Elektrische Eigenschaften von Stufenversetzungen in Silizium

Dissertation
zur Erlangung des Doktorgrades
der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Georg-August-Universität in Göttingen

vorgelegt von
Fritz Düster
aus Stuhm/Westpreußen

Göttingen 1976

Elektrische Eigenschaften von Stufenversetzungen in Silizium

Dissertation
zur Erlangung des Doktorgrades
der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Georg-August-Universität in Göttingen

vorgelegt von
Fritz Düster
aus Stuhm/Westpreußen

Göttingen 1976

UNIV.
LEIDEN
BIBL.

D 7

Referent: Prof.P.Haasen

Koreferent: Prof.W.Schröter

Tag der mündlichen Prüfung: 1.7.1976

1. Einleitung 2

2. Theorie der elektrischen Eigenschaften von Stufenversetzungen 5

3. Experimente 12

3.1. Probenpräparation 12

3.2. Elektrische Messungen 15

3.3. Hochmagnetfeldmessungen 16

3.4. Verformung und Versetzungsdichtebestimmung 20

4. Meßergebnisse 26

4.1. p-dotierte Proben 31

4.2. n-dotierte Proben 37

4.3. stark verformte niedrig p-dotierte und n-dotierte Proben und niedrig n-dotierte, nach der Verformung p-leitende Proben 37

4.4. Hallbeweglichkeit 41

5. Bestimmung von E_F und f aus dem Hall-Effekt 50

6. Vergleich mit der Theorie 53

7. Bestimmung des neutralen Versetzungsniveaus 60

8. Stark verformte Proben 62

9. Hallbeweglichkeit 66

10. Vergleich mit anderen Autoren 70

11. Zusammenfassung 72

Literaturverzeichnis 73

Physikalische Größen und Materialkonstanten für Silizium 76

Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41534920_0040

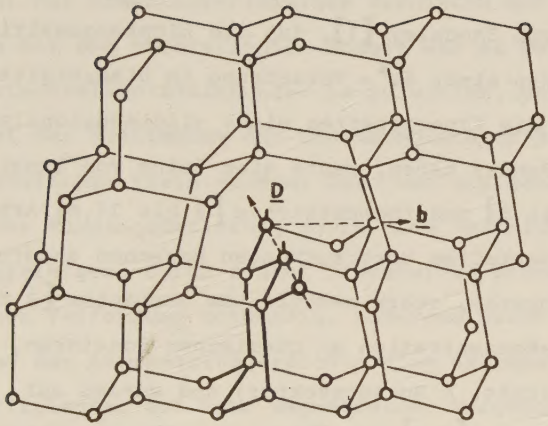

Abb. 1

Dangling-Bond-Modell einer 60° - Versetzung im Diamantgitter, D Versetzungslinie, b Burgersvektor.

1. Einleitung

Die Änderung der elektrischen Eigenschaften von Halbleitern auf Grund plastischer Verformung ist seit langem bekannt. Der Vorschlag von Shockley [1], daß die nichtabgesättigten Bindungen im Kern einer 60°- Versetzung im Diamantgitter (siehe Abb. 1) die Eigenschaften eines eindimensionalen, halbgefüllten Bandes haben, regte eine Reihe von experimentellen [2 bis 8] und theoretischen [9 bis 11,4] Arbeiten an. Die experimentellen Untersuchungen begannen an druck- oder biegeverformtem, stark n-dotiertem Germanium [2 bis 4] ($N_{cd} \approx N/_b$, N_{cd}-Konzentration an chemischen Donatoren, N Versetzungsdichte, b Burgersvektor) und wurden auf schwach p-dotiertes [6,7] ($N_{ca} \ll N/_b$, N_{ca} Konzentration an chemischen Akzeptoren) und schwach n-dotiertes [8] ($N_{cd} \ll N/_b$) Germanium erweitert. In einer neueren Arbeit von Wagner [12] wurden Schraubenversetzungen in n- und p-Germanium untersucht. Die experimentellen Ergebnisse konnten befriedigend durch die theoretische Arbeit von Schröter und Labusch [11] erklärt werden. Erste Messungen des Hall-Effektes an druckverformtem p-Silizium wurden von Weber [13, 14] durchgeführt. Sie ergaben eine qualitative Übereinstimmung mit dem theoretischen Modell. Für die elektrischen Messungen wurden bei 370° C einlegierte Gold-Kontakte verwendet. Eine beobachtete Abhängigkeit des neutralen Versetzungsniveaus E_o von der Versetzungsdichte lag vermutlich an der versetzungsbeeinflußten Golddiffusion von den Kontakten in die Probe. Ebenso konnte bei Weber eine merkliche Verunreinigung durch Fremdatome während der plastischen Verformung nicht ausgeschlossen werden.

Aufgabe dieser Arbeit war es nun, die Lage des neutralen Versetzungsniveaus, den entscheidenden, modellbedingten Parameter der Theorie, der unabhängig von Dotierung und Versetzungsdichte sein sollte, bei Silizium erneut zu bestimmen. Für einen zuverlässigen Vergleich der Hallmessungen mit dem theoretischen Modell war es notwendig, die experimentellen Bedingungen so zu wählen, daß die Fehler bei der Bestimmung des Besetzungsgrades der Versetzung möglichst klein wurden. Dazu war die genaue Messung der Ausgangsdotierung sowie eine peinliche Kontrolle der Verunreinigung durch flache Störstellen während der plastischen Verformung notwendig. Außerdem wurde zur exakten Ermittlung der Ausgangsträgerdichte eine Extrapolation des Hall-Koeffizienten auf hohe Magnetfelder vorgenommen, da in Silizium die Abhängigkeit des Hall-Effektes vom Magnetfeld und der Temperatur erheblich ist, wie sich aus einer Meßreihe an der Hochmagnetfeldanlage Braunschweig ergab [15] und nur bei hohen Feldern eine genau bekannte Beziehung zwischen Hallkonstante und Trägerdichte besteht. Weiterhin wurden die Untersuchungen auf n-dotiertes Silizium erweitert, um die Vorstellungen über die Gültigkeit des Modells zu vervollständigen. Eine Besonderheit für die elektrischen Eigenschaften von Versetzungen in Silizium liegt, im Vergleich zu Germanium, in einem größeren E_o (Si 0.30 eV [13], Ge 0.09 eV [7] oberhalb der Valenzbandkante). Damit ist die Wirkung der Versetzung in einem höheren Temperaturbereich zu finden, in dem die Verhältnisse bezüglich der Abschirmung der Versetzungsladung über den Gültigkeitsbereich der Theorie hinausgehen können. Die Bedingungen für diese Abweichungen sind untersucht worden.

Während man aus Hall-Messungen Aufschluß über die Besetzung der Versetzung mit Elektronen im thermodynamischen Gleichgewicht erhält, geben Beweglichkeitsmessungen im Vergleich mit Modellrechnungen [4, 16, 17, 18, 19] Auskünfte über die stattfindenden Streuprozesse. Der Streumechanismus beeinflußt auch den Hall-Effekt. Durch die Kenntnis des Temperaturverlaufs der Beweglichkeit hat man eine gute Kontrolle über den vorherrschenden Streuprozeß, aus dem man diesen Einfluß abschätzen kann.

2. Theorie der elektrischen Eigenschaften von Stufenversetzungen

In der umfassenden Abhandlung von Labusch und Schröter [20] über die elektrischen Eigenschaften von Versetzungen in Halbleitern sind die bisherigen Modelle und Rechnungen [9, 10, 11, 4] in ihren Grundlagen untersucht und verglichen worden. Die Arbeit von Schröter und Labusch [11] gibt darin in Übereinstimmung mit Experimenten und Modellüberlegungen die Verhältnisse in einem Elementhalbleiter mit Versetzungen am angemessensten wieder. Besonders bei höheren Temperaturen ist die Berechnung des Versetzungspotentials mit Hilfe der linearisierten Poissongleichung am geeignetsten.

Ausgehend von dem Modell eines eindimensionalen, im neutralen Zustand halb gefüllten Bandes für die Versetzungszustände, wird in [11] für zusätzliche positive oder negative Ladungen, die auf der Versetzungslinie lokalisiert sind, unter Berücksichtigung von Störungen der Valenzbandzustände im Sinne eines starren Bandmodells eine Besetzungsstatistik durchgeführt. Dabei wird angenommen, daß z.B. alle chemischen Akzeptorzustände mit Elektronen besetzt sind, und daß die zusätzlichen Versetzungsladungen auf verschiedenen Versetzungen miteinander wechselwirken können und durch die Umordnung von freien Ladungsträgern abgeschirmt werden. Unter der Bedingung, daß für die Besetzung des Valenzbandes eine Boltzmannverteilung angenommen werden kann, was bedeutet, daß lokale Unterschiede in der Löcherdichte im Vergleich zur mittleren Dichte klein sind, erhalten Schröter und Labusch für die Fermienergie E_F in p-Material, das mit chemischen Akzeptoren der Konzentration N_{ca} dotiert ist:

$$E_F = E_o + E_e(f)$$

mit $$E_e(f) = \frac{e^2}{2\pi\epsilon b} f\left[\ln\left(\frac{\lambda}{R_o}\right) + \frac{1}{4}\left(\frac{N_{ca}}{p} + 1\right)\right] \qquad (1)$$

$E_e(f)$ ist die elektrostatische Energie, um deren Betrag das neutrale Versetzungsniveau E_o bei einer Besetzung f mit Elektronen relativ zur ungestörten Valenzbandkante verschoben wird. Hierbei ist e die Elementarladung, ϵ die Dielektrizitätskonstante, b der Burgersvektor, p die Löcherdichte und

$$\lambda = \sqrt{\frac{\epsilon k_B T}{e^2 p}} \qquad (2)$$

die Debye'sche Abschirmlänge. k_B ist die Boltzmann-Konstante. R_o richtet sich danach, wie die Ladung auf der Versetzung verteilt ist. Darauf wird gleich noch eingegangen. Alle Energien werden in dieser Arbeit auf die Valenzbandkante bezogen. Eine Verschiebung ξ der Besetzungsgrenze innerhalb des Versetzungsbandes auf Grund der zusätzlichen Ladung (siehe Abb. 2) ist gegenüber E_e sehr gering und wird ebenso wie ein Konfigurationsentropieterm für die Verteilung der zusätzlichen Ladungen auf der Versetzung in der Theorie vernachlässigt [7, 11, 20]. Bei der Erweiterung der Theorie auf n-dotiertes Material ist in (1) N_{ca} durch $-N_{cd}$, die Konzentration an chemischen Donatoren, und p durch -n, die Elektronendichte, zu ersetzen.

Über die Beziehung $f = \frac{p - N_{ca}}{N_b}$ (3)

und $$E_F = k_B T \ln \frac{C_v T^{3/2}}{p} \qquad (4)$$

für p-dotiertes Material, wobei N die Versetzungsdichte und $C_v T^{3/2}$ die effektive Zustandsdichte im Valenzband sind, und

$$f = \frac{N_d - n}{N_b} \qquad (5)$$

und $$E_F = E_G(T) - k_B T \ln \frac{C_L T^{3/2}}{n} \qquad (6)$$

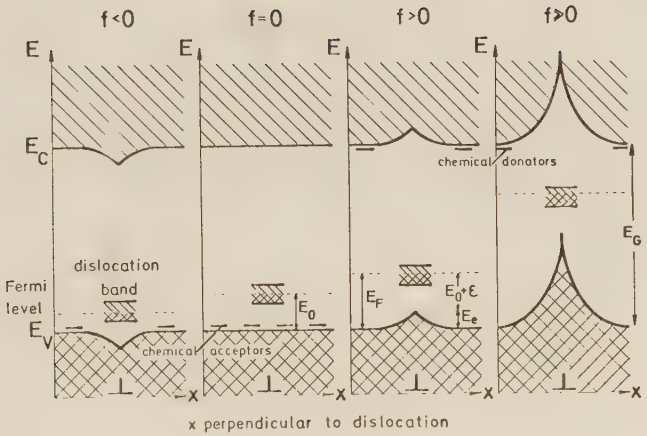

Abb. 2

Bandschema eines Halbleiters mit Versetzungsband. Aufgetragen ist die Energie in Abhängigkeit vom Ort senkrecht zur Stufenversetzungslinie ⊥, E_c Leitungsbandkante, E_v Valenzbandkante, E_G Breite der Bandlücke. Siehe Text.

für n-dotiertes Material, wobei $C_L T^{3/2}$ die effektive Zustandsdichte im Leitungsband und $E_G(T)$ die temperaturabhängige Bandlücke sind, kann (1) mit experimentellen Ergebnissen verglichen werden. Die einzigen anzupassenden Parameter, durch die die elektrischen Eigenschaften von Stufenversetzungen vollständig bestimmt werden, sind E_o und R_o. Dabei ist für $f = 0$

$$E_o = k_B T_o \ln \frac{C_v T_o^{3/2}}{p_o} \qquad (7)$$

unabhängig von der Versetzungsdichte und der Dotierung und wird direkt aus dem Schnittpunkt der Kurven für die Trägerdichte als Funktion der Temperatur für die unverformte und verformte Probe bestimmt. Dort gilt $p_o = N_{ca}$.
In Abbildung 2 ist für die verschiedenen Ladungszustände der Versetzung ein Bandschema mit dem neutralen Versetzungsniveau in der unteren Hälfte der Bandlücke aufgezeichnet. Für $f = 0$ ist die Versetzung neutral, die Fermienergie liegt in der Versetzungsbandmitte, und die Bandkanten sind ungestört. Für $f > 0$ ist die Versetzung negativ und für $f < 0$ positiv geladen. Die durch die Aufladung der Versetzung bedingten Störungen der Bandkanten sind durch die Bandaufbiegungen angedeutet. Während in p-dotiertem Material die Versetzung neutrales Verhalten ($f = 0$), Akzeptorverhalten ($f > 0$) oder Donatorverhalten ($f < 0$) zeigen kann, ist sie in n-dotiertem Material immer negativ geladen ($f \gg 0$) und wirkt somit nur als Akzeptor.
Bei Schröter und Labusch [11] ist R_o in Gleichung (1) der innere Abschneideradius für das Versetzungspotential, das am Ort der Versetzung eine logarithmische Singularität aufweist. Sie nehmen an, daß die zusätzlichen Ladungen im Abstand $\frac{b}{|f|}$ entlang der Versetzungslinie aufgereiht sind.

Man findet Gleichung (1) immer mit $R_o = \frac{b}{|f|}$

also $$E_e(f) = \frac{e}{2\pi\epsilon b} f\left[\ln\left(\frac{\lambda|f|}{b}\right) + \frac{1}{4}\left(\frac{N_{ca}}{p}+1\right)\right] \qquad (8a)$$

wiedergegeben [8, 11, 12, 20 bis 22]. In [20] erwähnen Labusch und Schröter jedoch, daß es mit der Voraussetzung, daß die Versetzungszustände ein eindimensionales Band bilden, in dem die Elektronen frei beweglich sind, verträglicher ist, die Annahme der äquidistanten Ladungsverteilung auf der Versetzung zu vermeiden. Dazu müßte, bei der Berechnung des Potentials, die δ - Funktion für die Ladung auf der Versetzung in der Poissongleichung durch $|\psi|^2$, die Dichte der Versetzungskernzustände, ersetzt werden. $R_o = r_o$ wäre dann die Halbwertsbreite dieser Funktion, die auf Grund der Bindungsverhältnisse im Kern von der Größe einer Gitterkonstanten sein sollte [23]. Abhängig von der Dichte der Versetzungskernzustände hat $|\psi|^2$ den Charakter einer linienhaften Funktion. Das würde bedeuten, daß die zusätzlichen Elektronen einen Ladungsschlauch entlang der Versetzungslinie bilden. Dann wird Gleichung (1)

$$E_e(f) = \frac{e}{2\pi\epsilon b} f\left[\ln\left(\frac{\lambda}{r_o}\right) + \frac{1}{4}\left(\frac{N_{ca}}{p}+1\right)\right] \qquad (8b)$$

mit konstantem r_o. Die Steigung für (8b) ist für f = 0

$$\left.\frac{dE}{df}\right|_{f=0} = \frac{e}{2\pi\epsilon b}\left[\ln\left(\frac{\lambda}{r_o}\right) + \frac{1}{2}\right] \qquad (9)$$

unabhängig von der Anzahl der Versetzungszustände und über λ nur schwach abhängig von der Dotierung. (8b) hat für kleine f einen linearen Verlauf, wohingegen (8a) in der Nähe von f = 0 die Form einer Wendeparabel hat. Bei einem Wert für r_o von etwa 8 Å [23] unterscheiden sich die beiden Modellvarianten (8b) und (8a) durch einen

verschiedenen Skalenfaktor in f und damit durch eine unterschiedliche Anzahl der elektrisch aktiven Versetzungszustände, worauf in 6. noch näher eingegangen wird.
Die Gültigkeit von (4) und (6) haben zur Voraussetzung, daß örtliche Unterschiede in der freien Trägerdichte klein sind verglichen mit der mittleren Dichte. Das gilt genau wie die Linearisierung der Poissongleichung unter der Annahme, daß das Potential V, dessen räumliche Ausdehnung durch die Debye'sche Abschirmlänge λ beschrieben wird, klein gegen kT ist. Außerdem darf die Versetzungsdichte, auch bei einer Berücksichtigung der Wechelwirkung zwischen den Ladungen auf verschiedenen Versetzungen, nicht zu groß werden. Bei gleicher Dotierung ist λ für $E_F = E_o$ in Silizium größer als in Germanium, was bedeutet, daß die Gültigkeit von (4) und (6) eingeschränkt sein kann.
Ein Maß für die Überlappung der Versetzungspotentiale ist das Verhältnis der Querschnittsfläche $\frac{\pi d^2}{4}$ des zylinderförmigen Raumes, der einer Versetzung zur Verfügung steht, wenn die Versetzungen den Abstand $d = \frac{1}{\sqrt{N}}$ haben, zum Querschnitt $\pi\lambda^2$ des Zylinders mit dem Radius λ, in dem das Coulombpotential einer Versetzung durch freie Ladungsträger abgeschirmt wird:

$$\frac{4\lambda^2}{d^2} \qquad (10)$$

Für einen Vergleich von Germanium und Silizium sind in Tabelle 1 die Größen T, λ und $\frac{4\lambda^2}{d^2}$ für die neutrale Temperatur für einige Dotierungen N_{ca} angegeben. Dabei sind T_o und λ_o aus (7) und (2) mit den Materialgrößen von Germanium und Silizium (Seite 76) berechnet worden (E_o = 0.09 eV für Germanium und 0.3 eV für Silizium). Für die Bestimmung von d

wurde eine durch plastische Verformung gut erreichbare Versetzungsdichte von $10^8 cm^{-2}$ gewählt.

Tabelle 1

	Ge			Si		
N_{ca} [cm^{-3}]	T_o [K]	λ_o [Å]	$\frac{4\lambda^2}{d^2}$	T_o [K]	λ_o [Å]	$\frac{4\lambda^2}{d^2}$
$2\ 10^{14}$	128.2	$2.2\ 10^3$	0.20	365.0	$3.2\ 10^3$	0.42
$6\ 10^{13}$	115.0	$3.8\ 10^3$	0.59	333.1	$5.6\ 10^3$	1.3
10^{13}	99.5	$8.7\ 10^3$	3.0	294.3	$1.3\ 10^4$	6.7

Man sieht, daß bei Silizium in der Nähe des neutralen Punktes sich das Versetzungspotential von etwa doppelt so vielen Versetzungen überlagert wie bei Germanium. Für kleine Dotierungen ist

$$\frac{4\lambda^2}{d^2} \ll 1 \qquad (11)$$

nicht mehr erfüllt.

Es sei noch bemerkt, daß die Aufspaltung von Versetzungen in Partialversetzungen, wie sie heute in Silizium zu 90% [24] der Versetzungslänge beobachtet wird, die elektrischen Eigenschaften von Versetzungen kaum beeinflußt, da Aufspaltungsweiten von 50 bis 100 Å klein sind gegen die Abschirmlänge des Coulombpotentials. Weiterhin gehen in die Theorie keine Annahmen über die spezielle Struktur des Versetzungskerns ein. Eine Vergrößerung von r_o auf 100 Å läßt allerdings die mit Hilfe eines Deformationspotentials abgeschätzte Bindungsenergie für gebundene Zustände auf der Versetzung verschwindend klein werden [23]. Die Streuung von freien Ladungsträgern an dem, durch Partialversetzungen aufgespannten, ungeladenen Stapelfehler, ist ebenfalls klein gegen die Streuung am weitreichenden Coulombpotential.

3. Experimente

In einer Serie von Silizium-Einkristallen wurden die Temperaturabhängigkeit der Hallkonstanten R_H und - über die elektrische Leitfähigkeit σ - die Hallbeweglichkeit $\mu = \sigma R_H$ vor und nach plastischer Verformung bestimmt. Parameter waren Dotierung (N_{ca}, N_{cd}) und Versetzungsdichte.

3.1. Probenpräparation

Die verwendeten Proben wurden aus zonengezogenen Silizium-Einkristallscheiben der Firma Wacker-Chemitronic Burghausen herausgesägt (Sauerstoff unter der Nachweisgrenze 1 ppm). Die Dotierungen lagen zwischen $3 \cdot 10^{14} cm^{-3}$ an chemischen Akzeptoren (Dotierungselement Bor) und $8 \cdot 10^{14} cm^{-3}$ an chemischen Donatoren (Dotierungselement Phosphor). Die durch Ätzgrübchenzählungen bestimmte eingewachsene Versetzungsdichte betrug etwa $10^4 cm^{-2}$. Die für die Verformung bestimmten Proben hatten Abmessungen von ca. 5x5x25 mm^3. Direkt neben jeder Meßprobe (Bezeichnung M) wurde je eine Vergleichsprobe (Bezeichnung V) mit den Abmessungen 4x4x20 mm^3 ausgesägt. Die Längsachse der Proben besaß eine [123]-Orientierung und lag damit in einem Einfachgleitung begünstigenden Bereich des Standarddreiecks. Die Seitenflächen hatten eine [451]- bzw. [111]-Orientierung. Für die elektrischen Messungen wurden die Proben geschliffen und mit Diamantpaste der Körnung 7 μ mechanisch poliert. Anschließend wurden sie in KOH-Lösung (10 Perlen auf 100 ml H_2O) gekocht und nach dem Ausdünnen der Lösung mit Wasser auf einem Papiertuch

getrocknet. In die (451) - Flächen wurden mit einem dünn mit Ga oberflächenlegierten, harten, gespitzten Aluminium-stift (Aluminium-Silizium-Legierung der Firma Metallgesellschaft) Strichkontakte eingeritzt, die danach mit Ga überzogen wurden. Die Stirnflächen wurden flächenhaft kontaktiert. Mit einem Verhältnis Probenlänge zu Probenbreite von 5 wird dadurch die Hallmessung nicht verfälscht [25]. Nach dem Einbau der so kontaktierten Probe in den Probenhalter wurden die Kontakte (Kontaktanordnung siehe Abb. 3) paarweise auf Güte (Übergangs-widerstand) und Symmetrie (Gleichrichterwirkung) geprüft.

Vor der Verformung wurden Meß- und Vergleichsprobe geschliffen (Planparallelität der Stirnflächen besser als 0.2°), mit Diamantpaste der Körnung 1 µ mechanisch poliert und anschließend in Perchlorat-Beize [26], die aus suprapuren Substanzen der Firma Merck bestand, 10 Minuten chemisch poliert und dann zweimal eine Minute in "White Etch" [26] chemisch gereinigt. Die Beiz- und Ätzlösungen wurden mit hochreinem Wasser (Widerstand $4 \cdot 10^7 \Omega$cm) ausgedünnt, Nach dem Trocknen auf einem Papiertuch wurden die Proben in die Verformungsapparatur eingebaut. Alle chemischen Probenpräparationen erfolgten in einem staubfreien Handschuhkasten, der unmittelbar an der Verformungsapparatur stand. Bei allen Proben, einschließlich der Vergleichsproben, wurden vor der Verformung Hallkonstante und Leitfähigkeit gemessen.

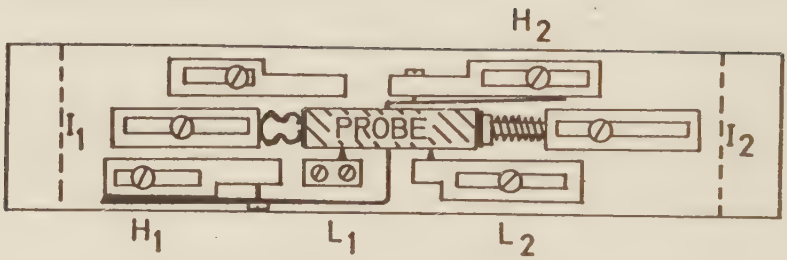

Abb. 3 Schematischer Aufbau des zylinderförmigen Probenhalters, aufgeklappt in Aufsicht. H_1, H_2 Abgriff (Molybdänschneiden) der Hall-Spannung; L_1, L_2 Abgriff der Leitfähigkeitsspannung; I_1, I_2 Stromzuführung.

3.2. Elektrische Messungen

Die elektrischen Messungen wurden im Hall-Labor des SFB 126 Göttingen/ Clausthal durchgeführt.
Der mit einem temperaturgeregelten, zylindrischen Widerstandsofen umgebene Probenhalter befand sich in einem auf 100 Torr evakuierten Stahlrohr in einem mit flüssigem Stickstoff gefüllten Badkryostaten zwischen den Polschuhen eines Elektromagneten der Firma Brucker. Die Temperatur am Probenort wurde zwischen 77 und 420°K mit einem Thermoelement auf 0.1 Grad genau bestimmt. Die Messung des Hall-Effektes und des Widerstandes erfolgte mit der Gleichstrommethode. Das Magnetfeld betrug 0.9386 Tesla. Gemessen wurde der Widerstand bis zu $10^6 \Omega$ für die verformten Proben.

Die Hallkonstante wurde unter Berücksichtigung der Probengeometrie im allgemeinen auf 2% genau gemessen. Für sehr stark verformte Proben hatte R_H bei den tiefsten Temperaturen einen Fehler von 12%. Der Fehler der Hallbeweglichkeit betrug 7% bis 15%. Bei hohen Temperaturen (über 200°K bei p-Proben, die nicht zu stark verformt waren) lag die relative Meßgenauigkeit von R_H unter 1%.
Der Probenstrom floß in [123] - und das Magnetfeld wies in [111] - Richtung, bezogen auf die Probengeometrie. Diese wurde bis auf kleine Abweichungen bei den verformten Proben für alle Messungen beibehalten.

3.3. Hochmagnetfeldmessungen

Zur Bestimmung des Niveaus für die neutrale Versetzung aus (3) für f = 0 sollte N_{ca} so genau wie möglich bestimmt werden. Wie aus Messungen des Hall-Effektes an Germanium [28, 27] bekannt ist, wird mit den in herkömmlichen Elektromagneten erzeugten Feldern von etwa 1 Tesla der für die exakte Bestimmung der Tägerdichte aus dem Hallkoeffizienten

$$R_H = \frac{r_p(\omega\tau,T)}{e\,p}$$

für p-dotiertes und (12)

$$R_H = \frac{r_n(\omega\tau,T)}{e\,n}$$

für n-dotiertes Material notwendige Hochfeldfall, für den $r_{p,n} = 1$ gilt [29], nicht erreicht. Der Faktor $r_{p,n}$ ist über $\omega\tau = B\mu(T)$ abhängig vom Magnetfeld B und über die temperaturabhängige Beweglichkeit $\mu(T)$ abhängig vom Streuprozeß. Dabei ist ω die Zyklotronfrequenz und τ die Relaxationszeit.

An der Hochmagnetfeldanlage in Braunschweig wurde die Magnetfeldabhängigkeit des Hallkoeffizienten in versetzungsfreiem Silizium bestimmt [15]. Die Silizium-Proben dafür wurden aus dem gleichen Probenmaterial wie die Meßproben gesägt. Eine Kontrollmessung des Halleffektes zeigte, daß die Dotierungen der einzelnen Proben in jedem Material nicht mehr als 3% voneinander abwichen. Die Abbildungen 4 und 5 zeigen den Hallkoeffizienten in Abhängigkeit von $\omega\tau$ für eine p- und eine n- dotierte Probe. Parameter ist die Temperatur. Es zeigt sich, daß auch bei Silizium bei tiefen Temperaturen ein Einmünden des $R_H(\omega\tau)$-Verlaufs in ein Plateaugebiet bei den größten Magnetfeldern [30] zu erkennen ist, in dem $r_{p,n} = 1$ sein sollte. Die Erreichung des Plateaus wird

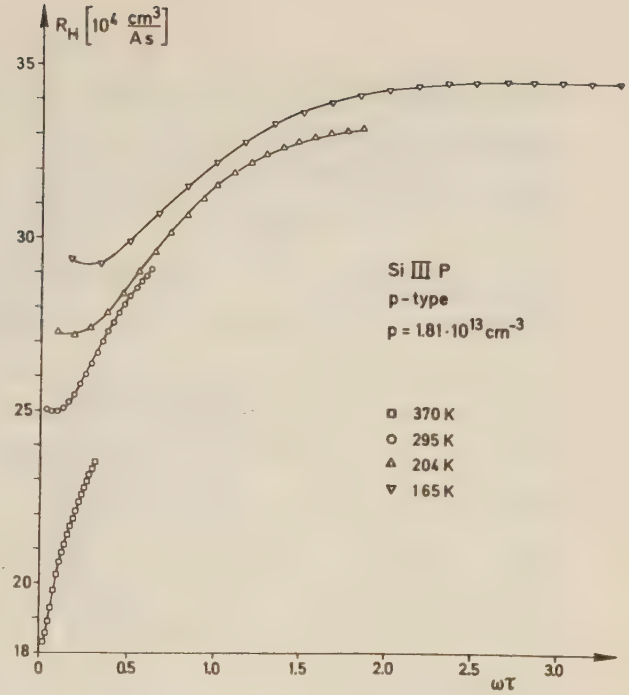

Abb. 4

Hallkoeffizient in Abhängigkeit von $\omega\tau$ (ω zyklotronfrequenz, τ Relaxationszeit) für p-dotiertes Si bei verschiedenen Temperaturen. Der erste Meßwert entspricht einem Magnetfeld von 0.74 Tesla, der letzte einem Feld von 14.76 Tesla.

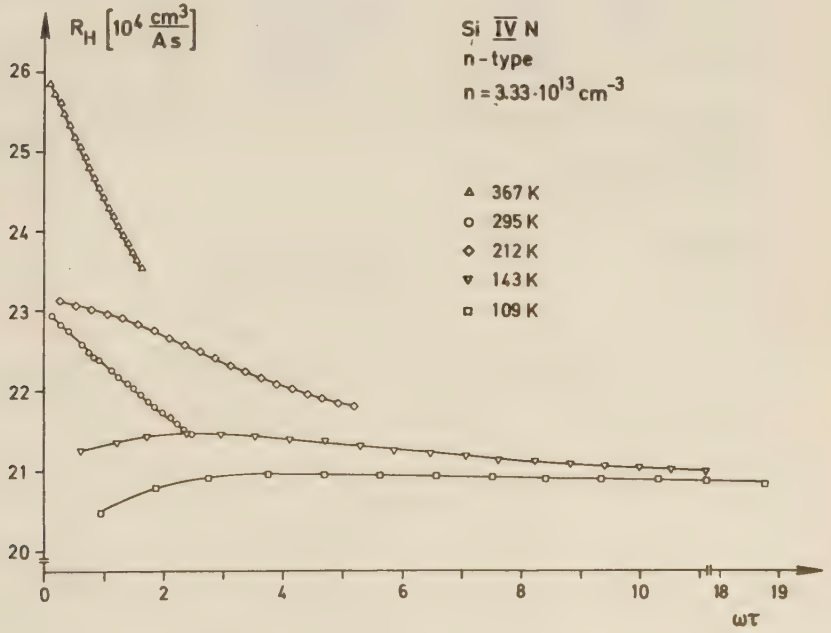

Abb. 5 Wie Abb.4 für n-dotiertes Silizium.

über $\omega\tau = \mu B$ neben B_{max} durch die Größe der Beweglichkeit bestimmt. Unter der Annahme, daß die Dotierungsatome bei diesen Temperaturen noch voll ionisiert sind und sich die Anzahl der Akzeptor- und Donatorzentren bis zu Temperaturen, bei denen sich die Eigenleitung bemerkbar macht konstant ist [31, 32], erhält man bei Extrapolation des Plateaugebietes nach $\omega\tau \to \infty$ aus dem Hallkoeffizienten die Dotierungskonzentration, die sich damit bei allen Dotierungen auf 3% genau festlegen ließ. Bei kleinen Magnetfeldern (das in Göttingen benutzte Feld liegt zwischen den ersten und zweiten Meßpunkten in den Abb. 4 und 5) und hohen Temperaturen sind danach Fehler bis zu 90% bei der Bestimmung der Trägerdichte möglich. Ein möglicher, aber im Vergleich zu Germanium unwahrscheinlicher Fehler liegt jetzt noch in einer Abhängigkeit von r von der Probenorientierung bei hohen Magnetfeldern. Eine solche Abhängigkeit ist bei Germanium nur bei kleinen Feldern gefunden worden [27].

In Tabelle 2 sind die Probenbezeichnungen und die durch Extrapolation bestimmten Dotierungen angegeben (mit N_{ca}^{o} und N_{cd}^{o} bezeichnet)

Tabelle 2

Probe	N_{ca}^{o} cm^{-3}	
I P	$2.92 \cdot 10^{14}$	
II P	$6.00 \cdot 10^{13}$	p-dotiert
III P	$1.81 \cdot 10^{13}$	
	N_{cd}^{o} cm^{-3}	
I N	$8.3 \cdot 10^{14}$	
II N	$3.08 \cdot 10^{14}$	
III N	$9.51 \cdot 10^{13}$	n-dotiert
IV N	$3.33 \cdot 10^{13}$	

Unter den gemachten Annahmen läßt sich mit diesen Werten der Korrekturfaktor r für die Göttinger Messungen für alle unverformten Proben in Abhängigkeit von der Temperatur bestimmen. Bei konstantem Magnetfeld gilt dann mit

$$N_{Ca}^{\circ} = \left(\frac{1}{R_H e}\right)_{H\to\infty}$$
$$N_{Cd}^{\circ} = \left(\frac{1}{R_H e}\right)_{H\to\infty} \quad : \qquad \text{HMFA Braunschweig}$$

$$N_{Ca}(T) = \left(\frac{1}{R_H e}(T)\right)_{B=konst.}$$
$$r_p(T) = \left(\frac{N_{Ca}^{\circ}}{N_{Ca}(T)}\right)_{B=konst.} \qquad (13)$$
$$N_{Cd}(T) = \left(\frac{1}{R_H e}(T)\right)_{B=konst.}$$
$$r_n(T) = \left(\frac{N_{Cd}^{\circ}}{N_{Cd}(T)}\right)_{B=konst.}$$

Nach einer vorläufigen Abschätzung stimmen diese Korrekturen mit von Messier und Flores [33] aus Drift-[34]und Hall-beweglichkeit gewonnenen r-Werten überein. Eine genaue Analyse der Temperatur- und Magnetfeldabhängigkeit ist in Vorbereitung.

3.4. Verformung und Versetzungsdichtebestimmung

Meßprobe sowie Vergleichsprobe wurden nach der in 3.1. beschriebenen chemischen Präparation innerhalb von etwa fünf Minuten und dicht nebeneinander in die von Schettler [28] konstruierte und beschriebene Verformungsapparatur eingebaut. Die Apparatur, für deren Probenraum ausschließlich Quarzteile verwendet wurden, ist vorher nach sorgfältiger Reinigung bei 860°C ausgeglüht und durch eine Kontrollglühung auf Sauberkeit geprüft worden. Eine Verunreinigung von unter $10^{13} cm^{-3}$ Dotierungsatomen wurde angestrebt. Die Meßprobe wurde bei 790°C unter Schutzgas (Formiergas "Spezial" 92% N_2, 8% H_2 der Firma Messer Griesheim) im Druckversuch statisch bis zum Wendepunkt (mit St bezeichnet) der Kriechkurve oder bis in die Verfestigung (mit ∞ bezeichnet) verformt. Die Verformungsdauer lag bei $t_{St} \approx 10$ min und $t_\infty \approx 40$ min. Anschließend wurde die Probe sofort entlastet und langsam mit einer Geschwindigkeit von weniger als 10°C pro Minute abgekühlt.

Der Verformungsgrad, das heißt die Versetzungsdichte N konnte nach der Beziehung [35]

$$\tau_{St} = \frac{3}{2} A \sqrt{N_{St}}$$
$$\tau_\infty = A \sqrt{N_\infty} \qquad (14)$$

durch Wahl der Spannung τ ($A = 10^{-3} kg\ mm^{-1}$) variiert werden. Durch die Verformung bis zum Wendepunkt der Kriechkurve erhält man hauptsächlich Einfachgleitung, während im Bereich der Verfestigung bis zu 20% Gleitung auf den sekundären Systemen auftreten kann. Man erhält bei der gewählten Verformungsart über 90% 60°- bzw. reine Stufenversetzungen [36].

Nach der Verformung wurden die Seitenflächen beider Proben um mindestens $1/_{10}$mm abgeschliffen. Von den Stirnflächen der verformten Probe wurde wegen größerer Verformungsinhomogenitäten etwas mehr abgenommen. Danach wurden beide Proben elektrisch gemessen.

Eine ausführliche Diskussion der Verunreinigung durch Fremdatome und der Erzeugung von Punktdefekten durch Versetzungen wird in [20] gegeben. Dabei zeigt es sich als am sinnvollsten, die Änderung der Dotierungskonzentration in der Vergleichsprobe während der Verformungsglühung auch für die verformte Probe anzunehmen. In Tabelle 3 ist die in den Vergleichsproben bestimmte Verunreinigung ausgedrückt in der Donatorkonzentration n_{cd} für die verschiedenen Proben angegeben. Dabei wurde n_{cd} bei T = 200°K aus dem Vergleich der ln $1/_{R_H e}(\frac{1000}{T})$- Kurven vor und nach der Glühung bestimmt:

$$n_{cd} = \left(N_{cd}(T)_{vor} - N_{cd}(T)_{nach}\right)_{T=200°K}$$

bzw.

$$n_{cd} = \left(N_{cd}(T)_{vor} - N_{cd}(T)_{nach}\right)_{T=200°K}$$

$\overline{N}_{ca} = N^{o}_{ca} - n_{cd}$ bzw. $\overline{N}_{cd} = N^{o}_{cd} - n_{cd}$ ist dann die angenommene Dotierung in der verformten Probe. In p-Silizium werden in n_{cd} alle eindiffundierten und elektrisch aktiven Donatoren, weil sie die flachen Akzeptoren kompensieren, aber nur relativ flach liegenden Akzeptoren erfaßt, in n-Silizium praktisch alle tiefliegenden Akzeptoren, aber nur relativ flach liegenden Donatoren. Die in Tabelle 3 zusammengestellten Ergebnisse deuten insgesamt auf ein relativ flaches Donatorniveau für die eindiffundierte Störstelle hin. Allerdings diffundieren typische tiefe Störstellen so schnell, daß sie sich während der hier

Tabelle 3

Verunreinigung in den Vergleichsproben während der Verformungsglühung, ausgedrückt in der Donatorkonzentration n_{cd} $\overline{N}_{ca}$, $\overline{N}_{cd}$ korrigierte Ausgangsdotierungen der Meßproben.

Probe	$n_{cd}\ 10^{12}\ [cm^{-3}]$	$\overline{N}_{ca}\ 10^{12}\ [cm^{-3}]$
I PM1	5	287
I PM2	5	287
I PM3	22	270
I PM4	14	278
II PM1	4	56
II PM2	4.3	55.7
III PM1/2	7	11.1
III PM1/1	2	16.1
III PM2/1	4	14.1
III PM2/2	3	11.7
III PM2/3	1	10.7
		$\overline{N}_{cd}\ 10^{12}\ [cm^{-3}]$
IV NM1	- 1	32.3
II NM1	-13	295
I NM1	-30	800
I NM2	-30	800
II NM2	-16	292
III NM1	- 2	93.1
III NM2	6	111
IV NM2	- 1	32.3

gewählten langsamen Abkühlung der Probe ausscheiden und damit dem elektrischen Nachweis entziehen werden.
Die Versetzungsdichte N der Proben wurde durch Auszählen von Ätzgrübchen bestimmt. Wegen möglicher Verunreinigung der Proben [37] durch die Sirtl-Ätzgrübchen-Beize [38] wurden die Anätzungen der Proben erst nach sämtlichen elektrischen Messungen bzw. Weiterverformungen vorgenommen. Eine (111)-Fläche wurde nach chemischer Politur 10 sec mit einer 2:3 Sirtl-Ätzgruben-Beize angeätzt. Die Proben wurden auf inhomogene Ätzgrübchen-Verteilungen wie Lüdersbänder oder Ähnliches untersucht. Ausgezählt wurde die Ätzgrübchendichte an mehreren Stellen zwischen den Hallkontakten und entlang der Probenmitte zwischen den Leitfähigkeitskontakten. Für alle Proben war die Ätzgrübchendichte im Rahmen der Zählgenauigkeit von 25% über die ausgemessene Länge konstant. Das Fehlen von Lüdersbändern ist vermutlich auf die relativ hohe Ausgangsversetzungsdichte zurückzuführen. In Tabelle 4 ist in der Spalte 3 die mittlere, lichtoptisch (Apertur 0.95, gelbgrünes Licht) ausgezählte Ätzgrübchendichte N_L und in Spalte 5 die nach (14) bestimmte Versetzungsdichte $N_{St,\infty}$ angegeben. Der Faktor g_τ in Spalte 4 bestimmt die Proportionalität der beiden Größen.

$$N_L = g_\tau N_{St,\infty}$$

Die Schwankungen in g_τ können neben den Ungenauigkeiten von N_L bedeuten, daß die Verformung nicht genau am Wendepunkt abgebrochen oder daß nicht weit genug bis in die Verfestigung verformt wurde. In diesem Rahmen kann der Vergleich von N_L und N_{St} als eine Bestätigung von (14) und dem dieser Beziehung zugrunde liegenden Modell [48, 49] gewertet werden.

Tabelle 4

Versetzungsdichten

$N_{St,\infty}$ bestimmt nach (14)

N_L lichtoptisch bestimmte Ätzgrübchendichte

$\overline{N}$ angepaßte, elektrisch aktive Versetzungsdichte

$g_\tau = N_L / N_{St,\infty}$, $g_L = \overline{N} / 1.5 \cdot N_L$

1	2	3	4	5
Probe	$\overline{N}\ [10^7 cm^{-2}]$	g_L	$N_L\ [10^7 cm^{-2}]$	g_τ	$N_{St,\infty}\ [10^7 cm^{-2}]$
I PM1	11	0.9	8	1.3	6 St
I PM2	39	1.6	16	1.6	10 St
I PM3	30	1.4	14	1.9	7.5 St
I PM4	7.5	0.55	9	1.2	8 ∞
II PM1	16	1.5	7	1.4	5 St
II PM2	33	2.2	10	1	10 St
III PM1/2	5	0.35	9.4	1.9	5 ∞
III PM1/1	14				5 St
III PM2/1	10				10 St
III PM2/2	10.3				10.3 ∞
III PM2/3	23		16	0.7	23 ∞
IV NM1	7.4		7.4	1.5	5 ∞
II NM1	30		14	0.5	30 ∞
I NM1			13	1.3	10 ∞
I NM2	45	1.95	15	0.6	25 ∞
II NM2	17	1.1	10	1	10 ∞
III NM1	5.8		5.8	1.9	3 ∞
III NM2	9.3		9.3	1.3	7 ∞
IV NM2			0.7	1.4	0.5 ∞

Ein Geometriefaktor für die Richtungsverteilung der Versetzungen im Kristall [40] wurde wie in [35] bei N_L nicht berücksichtigt.

Bei den bis zum Wendepunkt verformten Proben konnte die Spur der Hauptgleitebene deutlich durch Anhäufung von Ätzgrübchen im Abstand von einigen µm festgestellt werden. Bei der Verformung bis in die Verfestigung war das nicht so deutlich. Die so entstandene Versetzungsanordnung bzw. Inhomogenität im Kleinen hat bei der gewählten Geometrie ($\sphericalangle \neq 0$ zwischen Gleitebene und Magnetfeld bzw. Strom) nach [20] nur einen geringen Einfluß auf den Hall-Effekt.

4. Meßergebnisse

Im Temperaturbereich von 77°K bis 420°K wurden die Hallkonstante R_H und die Hallbeweglichkeit μ_H von p- und n-dotiertem Silizium vor und nach plastischer Verformung gemessen.

Die Abbildungen 6 bis 17 zeigen $1/R_H e$, den reziproken Hallkoeffizienten multipliziert mit der Elementarladung e, der bis auf den Korrekturfaktor $r_{p,n}$ der Trägerdichte entspricht, als Funktion der reziproken Temperatur, halblogarithmisch aufgetragen. Die Kurven der unverformten Proben zeigen das Verhalten eines Halbleiters im sogenannten Erschöpfungsbereich. Die schwache Temperaturabhängigkeit ist nach 3.3. auf die von $r_{p,n}$ zurückzuführen. In den Abbildungen 18 bis 31 ist die Hallbeweglichkeit als Funktion der Temperatur doppeltlogarithmisch aufgetragen. Die Probenbezeichnungen enthalten ein P für p-dotierte Proben und ein N für n-dotierte Proben. Die römischen Zahlen geben die Ausgangsdotierungen entsprechend Tabelle 2 an. Die genauen Dotierungen nach der Verformung sind in Tabelle 3 zu finden. In Tabelle 4 Spalte 3 ist die gezählte Ätzgrübchendichte N_L angegeben.

Die Ergebnisse der Hallmessung lassen sich in Abhängigkeit von Dotierung und Verformungsgrad grob in drei Gruppen einteilen.

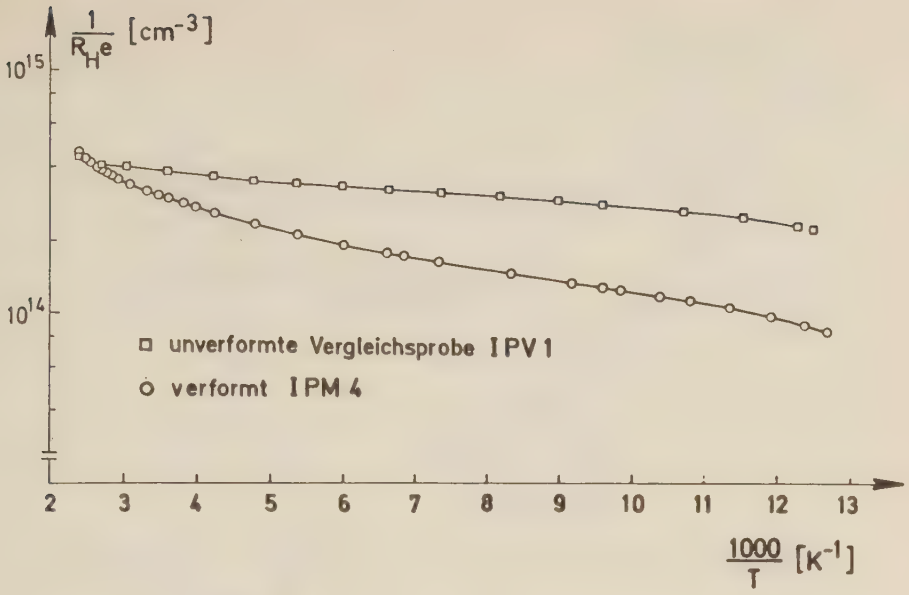

Abb. 6

Abb. 6 bis 9: $1/R_H e$ als Funktion der reziproken Temperatur für p-Proben gleicher Ausgangsdotierung vor und nach plastischer Verformung, nach steigendem Verformungsgrad geordnet. (genaue Dotierung und Versetzungsdichte siehe Tabelle 3 und 4)

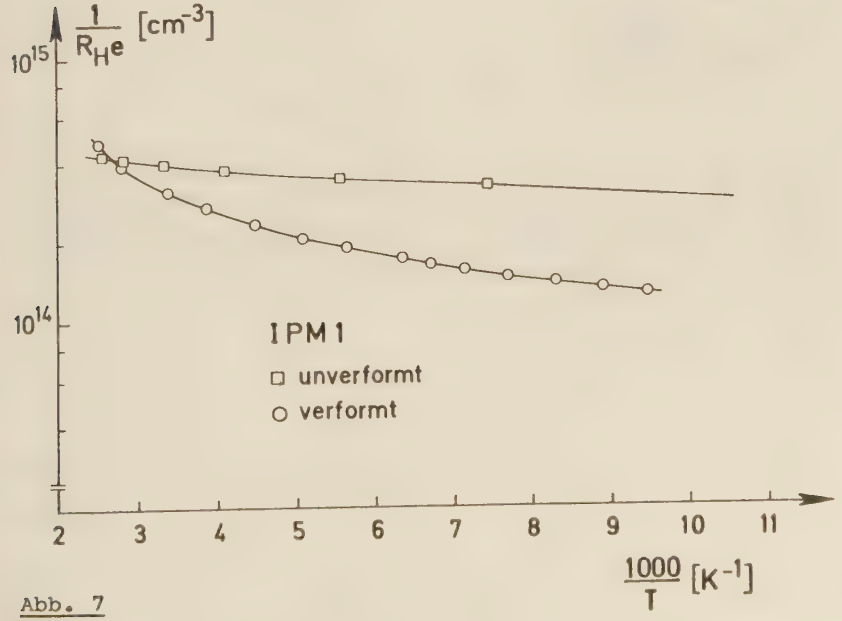

Abb. 7

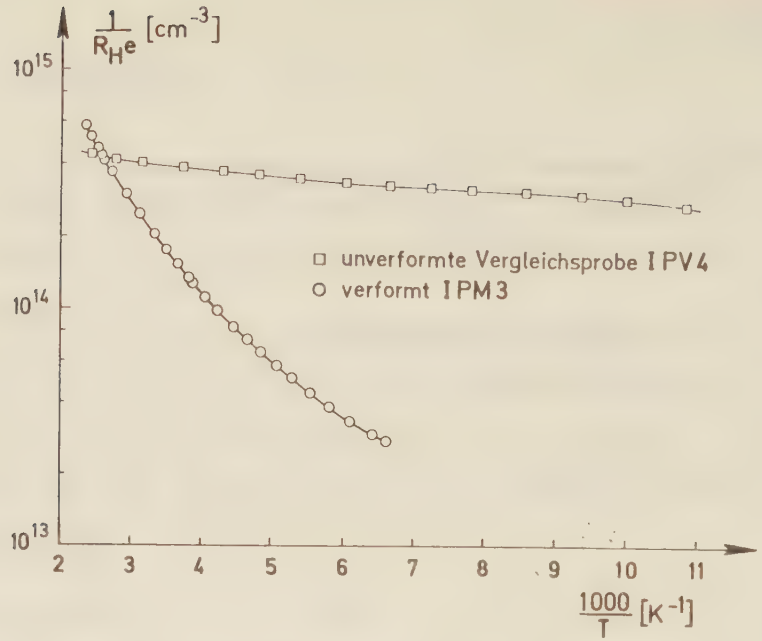
$\frac{1}{R_H e}$ [cm^{-3}]
10^{15}
10^{14}
10^{13}
2 3 4 5 6 7 8 9 10 11
$\frac{1000}{T}$ [K^{-1}]
□ unverformte Vergleichsprobe I PV4
○ verformt I PM3

Abb. 8

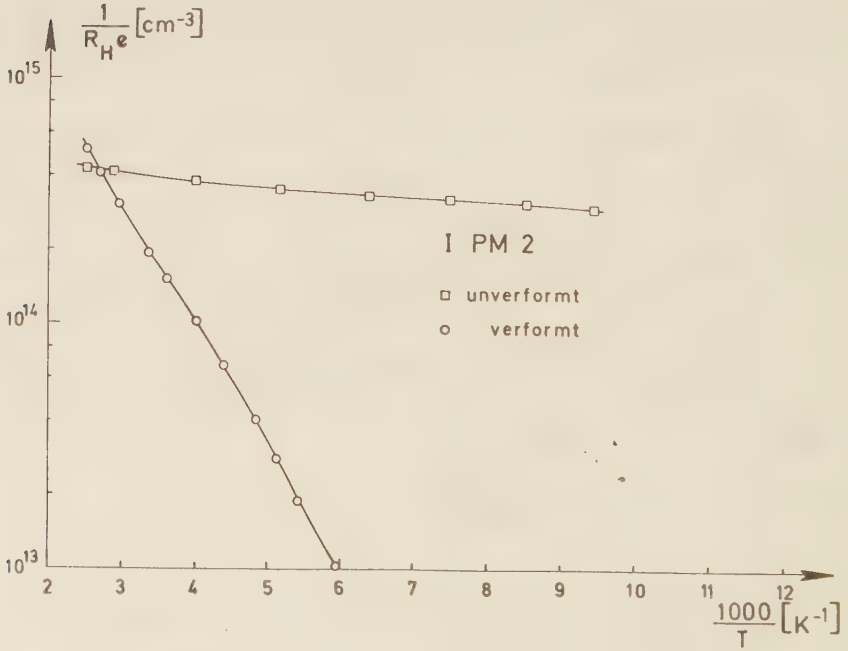
$\frac{1}{R_H e}$ [cm^{-3}]
10^{15}
10^{14}
10^{13}
2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12
$\frac{1000}{T}$ [K^{-1}]
I PM 2
□ unverformt
○ verformt

Abb. 9

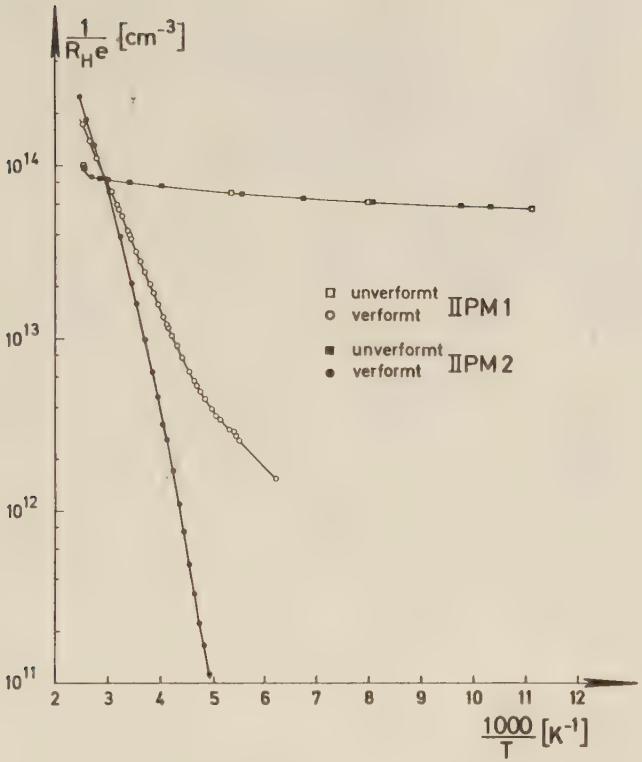

Abb. 10

$1/R_H e$ als Funktion der reziproken Temperatur für zwei p-dotierte Proben gleicher Ausgangsdotierung vor und nach plastischer Verformung. II PM2 ist stärker verformt als II PM1. (Genaue Dotierung und Versetzungsdichte siehe Tabelle 3 und 4)

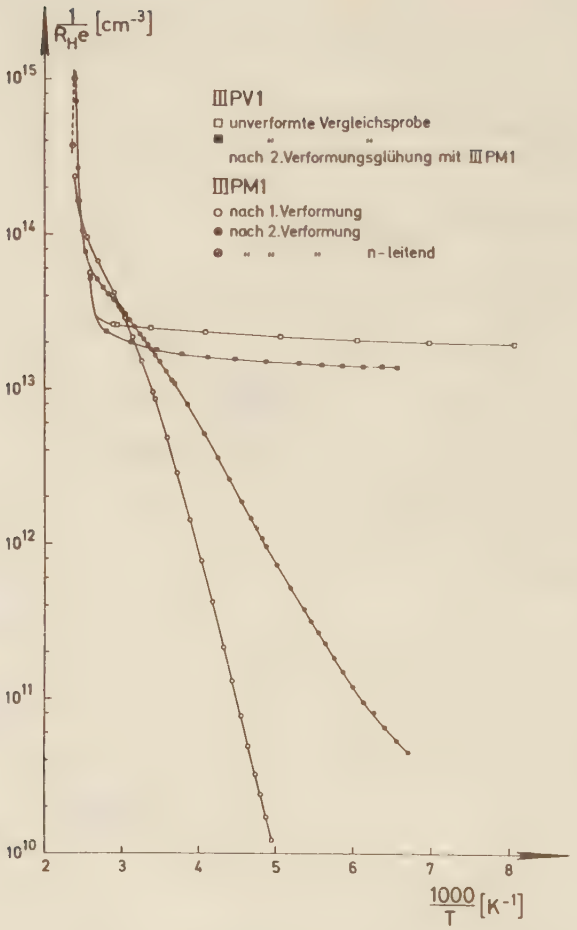

Abb. 11

$1/R_H e$ als Funktion der reziproken Temperatur einer niedrig p-dotierten Probe. Die 1. Verformung (III PM1/1) erfolgte bis zum Wendepunkt der Kriechkurve, die 2. Verformung (III PM1/2) bis in die Verfestigung.

4.1. p-dotierte Proben

Die Abbildungen 6 bis 9 zeigen den ln $1/R_{He}$ ($\frac{1}{T}$) - Verlauf von verschieden stark verformten Proben der Dotierung I P. Bis auf Probe I PM4, die bis in die Verfestigung verformt wurde, sind die Proben bis zum Wendepunkt der Kriechkurve verformt. Die Kurven für die unverformten und verformten Proben schneiden sich. Die Temperatur des Schnittpunktes für die einzelnen Proben ist in Tabelle 5 Spalte 2 angegeben. Oberhalb der Temperatur des Schnittpunktes wirken die Versetzungen als Akzeptoren, unterhalb als Donatoren. Am Schnittpunkt sind die Versetzungen neutral. Die Temperaturen der Schnittpunkte weichen etwas voneinander ab. Diese Abweichungen entsprechen einer Änderung der Ausgangsdotierung von weniger als 8%, was in den Grenzen der in Tabelle 3 angegebenen Verunreinigung durch Fremdatome bleibt. Zur Verdeutlichung ist in Tabelle 5 Spalte 1a für die vier Proben $1/R_{He}$ bei der mittleren Schnittpunkttemperatur von 379°K angegeben. Im Rahmen dieser Genauigkeit ist der Schnittpunkt unabhängig von der Versetzungsdichte. Durch diese Tatsache wird das in 2. beschriebene Modell eines eindimensionalen, halbgefüllten Versetzungsbandes in einem wesentlichen Punkt bestätigt.

Aus Abbildung 10 ist dasselbe Verhalten für die Dotierung II P zu entnehmen.
Die Probe III PM1, gezeigt in Abbildung 11, ist zweimal verformt worden. Die erste Verformung (III PM1/1) erfolgte bis zum Wendepunkt der Kriechkurve, die zweite (III PM1/2)

bis in die Verfestigung. Die nach (14) bestimmten Versetzungsdichten sollten gleich sein ($N_{St} = N_{\infty}$, siehe Tabelle 4). Der Kurvenverlauf nach der 1. Verformung ist sehr steil. Damit zählt III PM1/1 schon zu den stark verformten Proben, die in 4.3. besprochen werden. Dagegen ist der sorgfältig ausgemessene Kurvenverlauf nach der 2. Verformung III PM1/2 typisch für Silizium mit Stufenversetzungen. Da die Steigung bei der 2. Verformung abgenommen hat, muß die Zahl der elektrisch aktiven Verformungszentren auch abgenommen haben. Der Umschlag im Hochtemperaturbereich von p- nach n-Leitung schon vor der Eigenleitung [39] zeigt, daß dort aufgrund der größeren Elektronenbeweglichkeit Elektronenleitung eine Rolle spielt.

Tabelle 5

Nach (7) bestimmte Lage des Niveaus für die neutrale Versetzung E_o aus ln $1/R_He$ ($\frac{1}{T}$) am Schnittpunkt T_o der Kurven für die verformte und unverformte Probe, und $\overline{E}_o$ aus dem $E_F(f)$ - Verlauf für f = 0.

	1	1a	2	3	4
Probe	$\frac{1}{R_He}(T_o)\,[10^{13}cm^{-3}]$	$\frac{1}{R_He}(379\ K)\,[10^{13}cm^{-3}]$	$T_o[°K]$	$E_o[eV]$	$\overline{E}_o[eV]$
I PM1	42	44	370.4	0.332	0.336
I PM2	42	44.6	370.4	0.332	0.338
I PM3	42.7	40	386.1	0.348	0.352
I PM4	41.3	39.7	390.6	0.353	0.360
II PM1	8.31		337.8	0.346	0.352
II PM2	8.31		337.8	0.346	0.357
III PM1/2	2.48		313.5	0.351	0.336

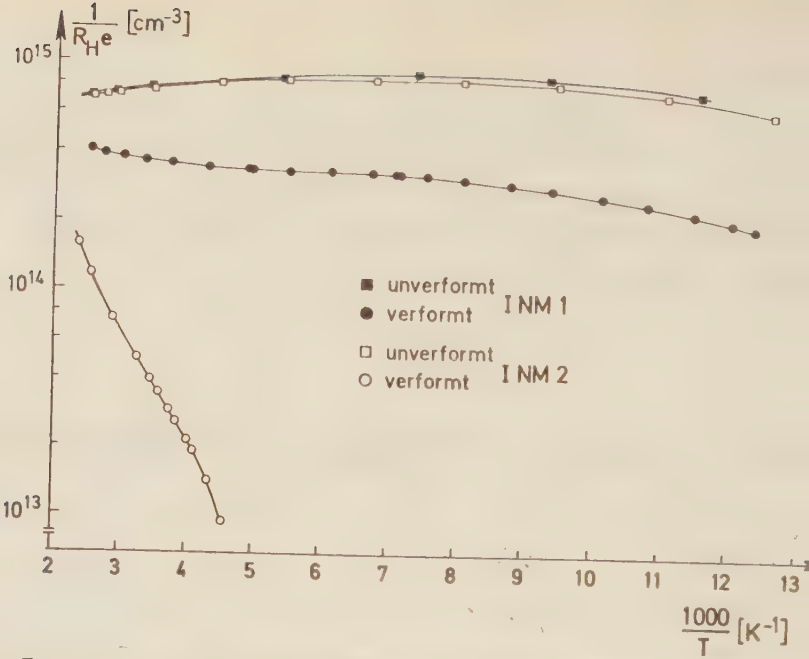

Abb. 12

$1/R_{He}$ als Funktion der reziproken Temperatur für zwei n-dotierte Proben vor und nach plastischer Verformung. I NM2 ist stärker verformt als I NM1.

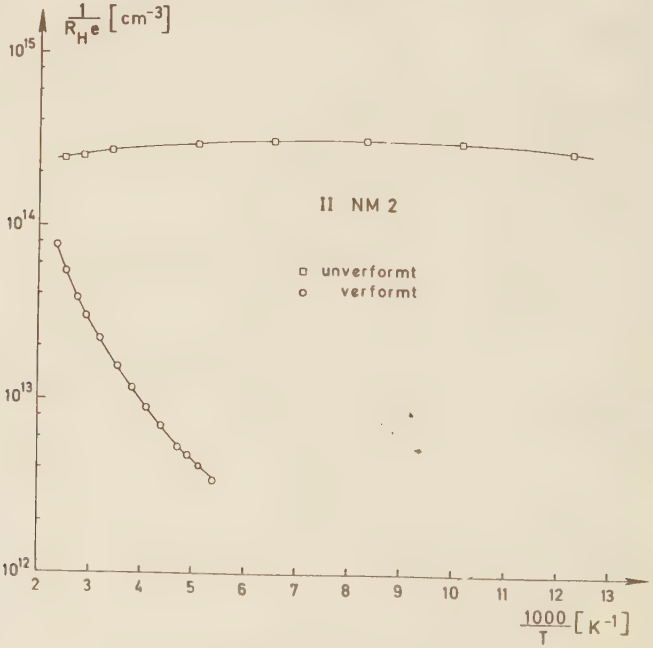

Abb. 13

$1/R_{He}$ als Funktion der reziproken Temperatur für eine n-dotierte Probe vor und nach plastischer Verformung.

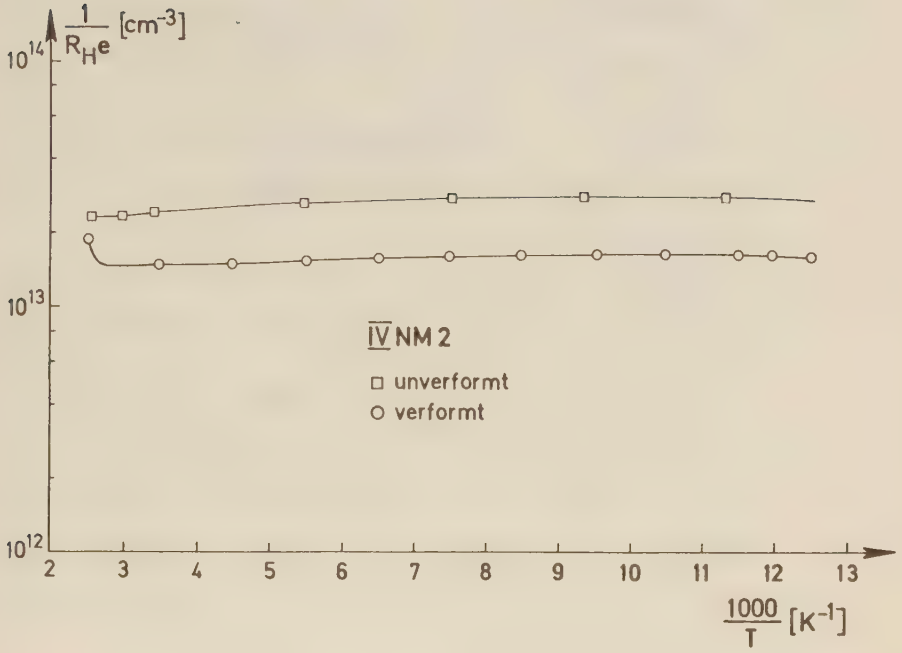

Abb. 14

$1/R_{He}$ als Funktion der reziproken Temperatur für eine schwach verformte, niedrig n-dotierte Probe.

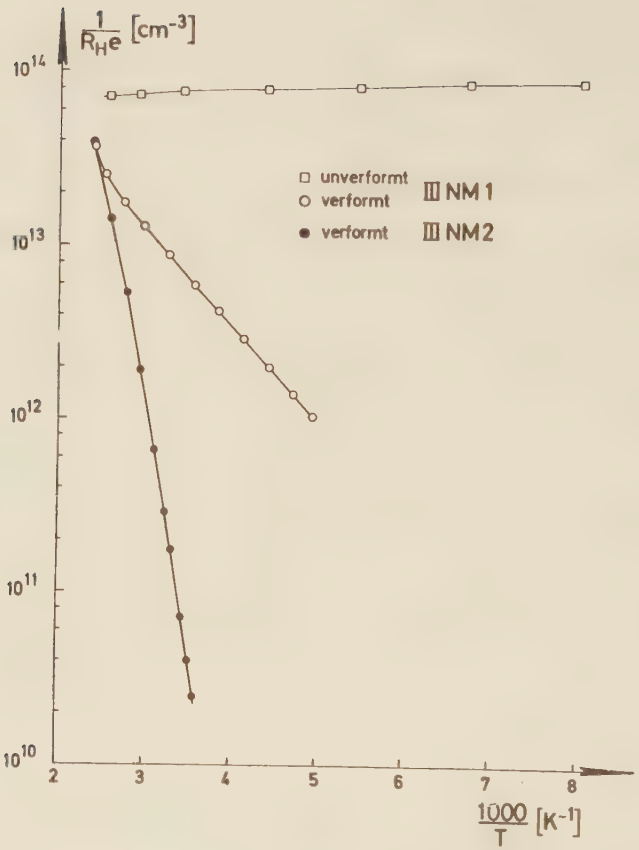

Abb. 15

$1/R_H e$ als Funktion der reziproken Temperatur für zwei n-dotierte Proben vor und nach plastischer Verformung. III NM2 ist stärker verformt als III NM1.

4.2. n-dotierte Proben

Die Abbildungen 12 bis 15 zeigen den $\ln 1/R_H e\left(\frac{1}{T}\right)$ - Verlauf von verschieden n-dotierten, unterschiedlich stark bis in die Verfestigung verformten Proben. Die Kurven für die unverformten und verformten Proben schneiden sich nicht. Die durch die Verformung eingebrachten Versetzungen wirken in n-dotiertem Silizium als Akzeptoren. Das bestätigt noch einmal, daß das Niveau der neutralen Versetzung in der unteren Hälfte des verbotenen Bandes liegt. Auffällig ist der steile Verlauf für die Probe III NM2, die, bei ihrem Verformungsgrad, mit ihrer niedrigen Dotierung schon zu den stark verformten Proben zählt.
Für n-dotiertes wie für p-dotiertes Silizium gilt:
Bei gleicher Dotierung nimmt die Steigung im $\ln 1/R_H e\left(\frac{1}{T}\right)$ - Verlauf mit dem Verformungsgrad zu. Bei gleichem Verformungsgrad nimmt die Steigung mit größer werdender Dotierung ab.

4.3. Stark verformte niedrig p-dotierte und n-dotierte Proben und niedrig n-dotierte, nach der Verformung p-leitende Proben

Abbildung 16 zeigt den $\ln 1/R_H e\left(\frac{1}{T}\right)$ - Verlauf für die Probe III PM2, die dreimal verformt worden ist. Die erste Verformung (III PM2/1) erfolgte bis zum Wendepunkt der Kriechkurve mit $N_{St} = 10^8 cm^{-2}$ (siehe (14) und Tabelle 4). Die zweite (III PM2/2) und dritte (III PM2/3) Verformung erfolgte bis in die Verfestigung mit den nach (14) bestimmten Versetzungsdichten $N_\infty = 1.03 \cdot 10^8 cm^{-2}$ bzw.

$N_{\infty} = 2.3 \cdot 10^{8} cm^{-3}$. Nach der zweiten Verformung hat die Zahl der elektrisch aktiven Verformungszentren zugenommen, da der Kurvenverlauf steiler geworden ist. Die dritte Verformung hat diesen Verlauf nicht mehr wesentlich geändert. Der steile Kurvenverlauf ist charakeristisch für niedrig dotierte, stark verformte Proben. Außer den Kurvenverläufen für die Proben III PM1/1 und III PM1/2 aus Abbildung 11 sind in Abbildung 16 nach der Beziehung (4) berechnete ln $p(\frac{1}{T})$ - Kurven konstanter Fermienergie gestrichelt eingezeichnet. 0.605 eV entspricht der intrinsischen Geraden [31]; bei 0.35 eV liegt etwa das Niveau für die neutrale Versetzung (siehe Kapitel 6). Entsprechend der theoretischen Beziehung (1) sollte unter Berücksichtigung von (4) die Fermienergie bei einer Akzeptorwirkung der Versetzung oberhalb von $E_o = 0.35$ eV liegen. Das gilt für die Probe III PM1/2. Die niedrig dotierten, stark verformten Proben III PM2/1,2,3 haben demgegenüber im ganzen ausgemessenen Temperaturbereich eine höhere Fermienergie als 0.35 eV. Die Fermienergie nimmt zu tiefen Temperaturen sogar zu. Diese Tendenz liegt außerhalb der Meßgenauigkeit. Der Verlauf der Kurve für die Probe III PM1/1 zeigt gerade den Übergang zur beschriebenen Gruppe der stark verformten Proben. Die Probe III NM2 (Abbildung 15) gehört, wie schon erwähnt, ebenfalls zu dieser Gruppe.

Die Beziehung (1) schließt nicht aus, daß niedrig n-dotierte Proben nach der Verformung p-leitend sein können. Die Anzahl der elektrisch aktiven Versetzungszentren ist dann, wie man auch bei Germanium [8] gefunden hat, sehr groß gegen die Anzahl der Dotierungsatome. Ein solches Verhalten zeigen die Proben II NM1 und IV NM1 in Abbildung 17.

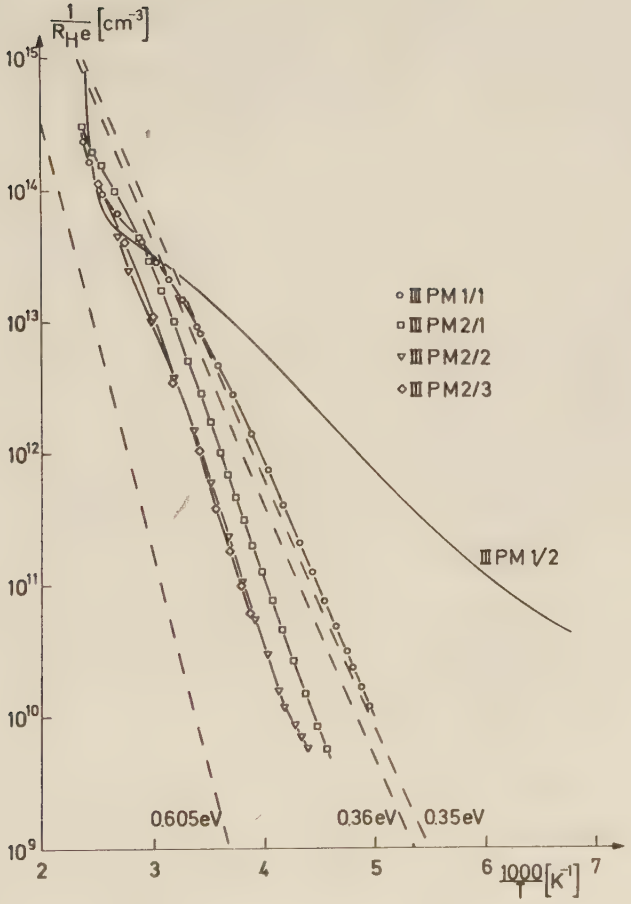

Abb. 16

$1/R_H e$ als Funktion der reziproken Temperatur einer niedrig p-dotierten Probe nach verschiedenen Verformungen, III PM1/1 und III PM1/2 sind aus Abb. 11. Näheres siehe Text.

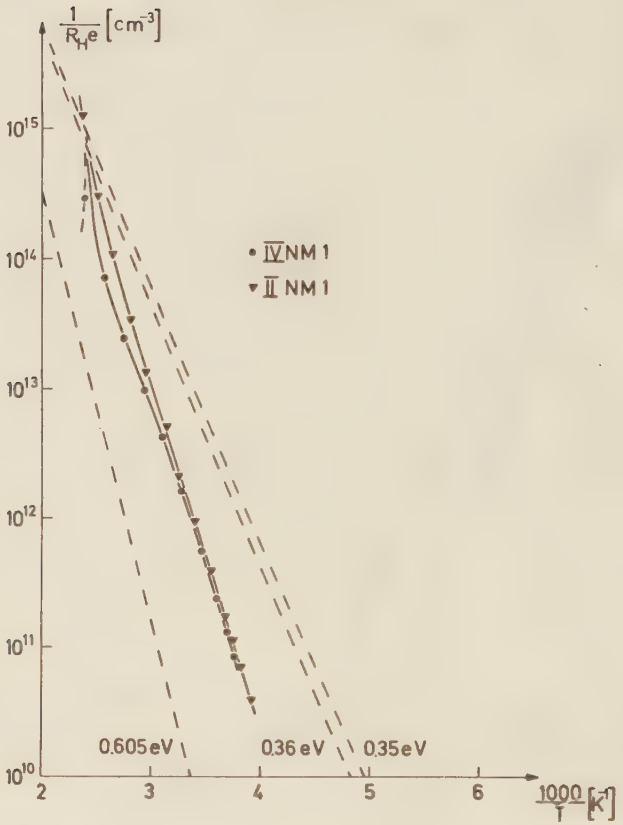

Abb. 17

$1/R_H e$ als Funktion der reziproken Temperatur von zwei unterschiedlich n-dotierten Proben, die nach der Verformung p-leitend waren. Näheres siehe Text.

Im Vergleich zu der niedrigsten verwendeten p-Dotierung kann man diese Proben als noch niedriger p-dotiert bezeichnen. Dem Verlauf der $\ln 1/R_H e(\frac{1}{T})$ - Kurve entsprechend gehören sie zu den stark verformten Proben.

4.4. Hallbeweglichkeit

Die Abbildungen 18 bis 30 geben den $\mu(T)$ - Verlauf für die besprochenen Proben wieder. Es zeigt sich, daß zu tieferen Temperaturen die Beweglichkeit bei gleicher Ausgangsdotierung der Proben sowohl bei n- als auch bei p-Material mit steigendem Verformungsgrad stärker reduziert wird. Bei gleichem Verformungsgrad ist die Reduktion der Beweglichkeit in niedriger dotiertem Silizium stärker. Da in unverformtem Silizium die Elektronenbeweglichkeit immer größer als die Löcherbeweglichkeit ist, kann die Streuung von Elektronen an geladenen Versetzungen empfindlicher nachgewiesen werden als die Streuung von Löchern an geladenen Versetzungen, wie ein Vergleich zwischen n- und p-Material zeigt. Theoretische Rechnungen liegen für die Streuung von Ladungsträgern an schwach geladenen Versetzungen vor. Für einen Vergleich von theoretischen und experimentellen Ergebnissen ist daher das Streuverhalten der Versetzung im Temperaturbereich um T_o geeignet, wie auch die Analyse der an Germanium gewonnenen Resultate gezeigt hat. Wegen des im Vergleich zu Germanium wesentlich höheren E_o- Wertes für die 60°-Versetzung liegt die neutrale Temperatur T_o in Silizium so hoch (300°K statt 80°K, siehe Tabelle 5 Spalte 2),

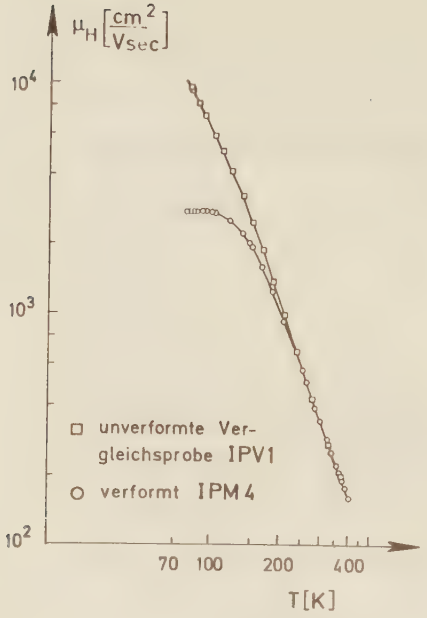

Abb. 18

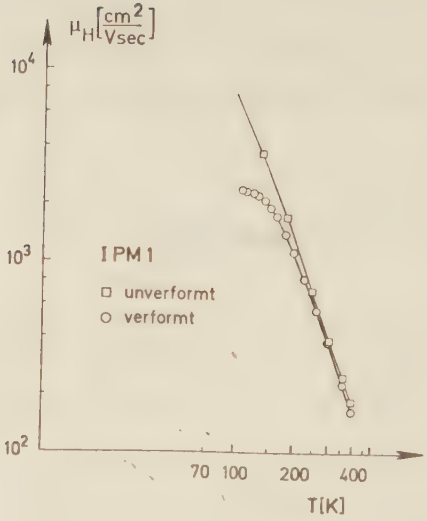

Abb. 19

Abb. 18 bis 21: Hallbeweglichkeit als Funktion der Temperatur für p-Proben gleicher Ausgangsdotierung vor und nach plastischer Verformung, nach steigendem Verformungsgrad geordnet.

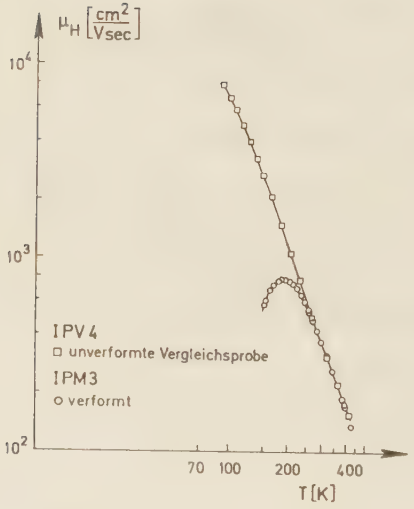

Abb. 20

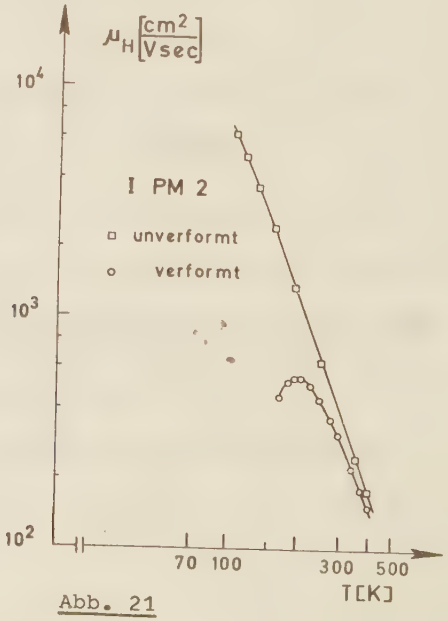

Abb. 21

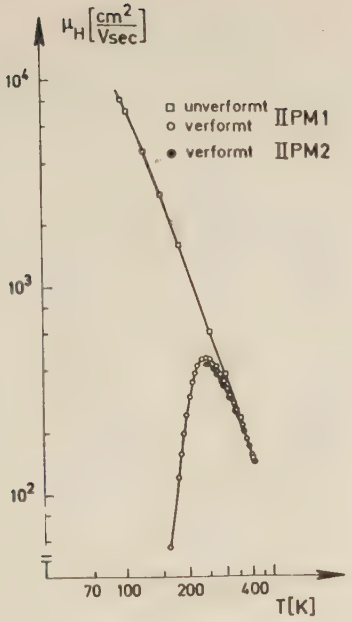

Abb. 22

Hallbeweglichkeit als Funktion der Temperatur für zwei p-dotierte Proben gleicher Ausgangsdotierung vor und nach plastischer Verformung. II PM2 ist stärker verformt als II PM1.

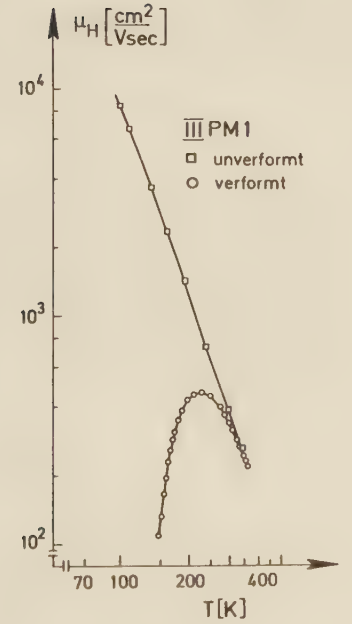

Abb. 23

Hallbeweglichkeit als Funktion der Temperatur für die p-dotierte Probe III PM1/2 nach der 2. Verformung.

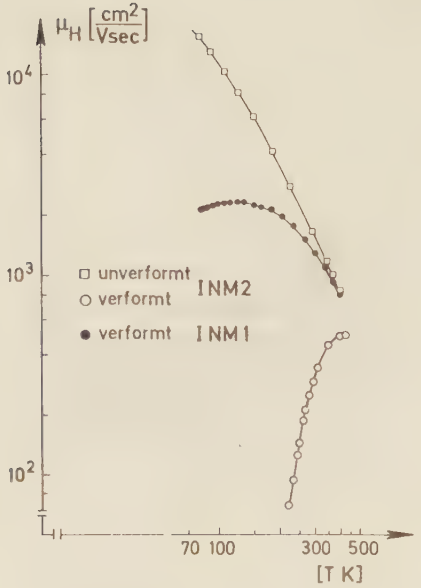

Abb. 24

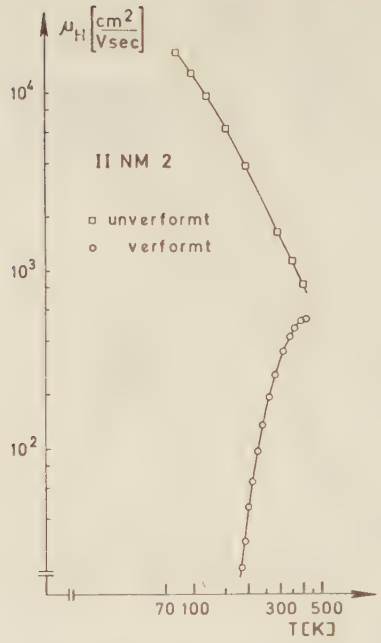

Abb. 25

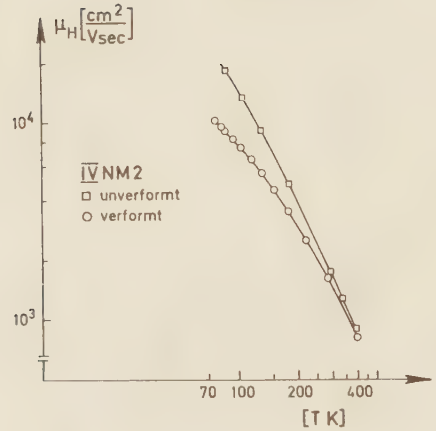

Abb. 26

Abb. 24 bis 26:
Hallbeweglichkeit als Funktion der Temperatur von verschieden n-dotierten, unterschiedlich stark verformten Proben.

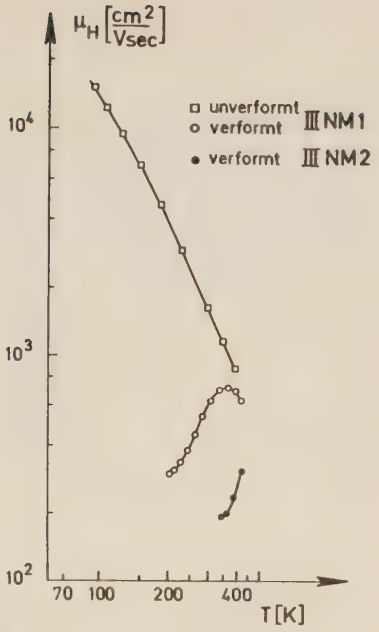

Abb. 27

Hallbeweglichkeit als Funktion der Temperatur für zwei niedrig n-dotierte Proben vor und nach plastischer Verformung. III NM2 ist stärker verformt als III NM1.

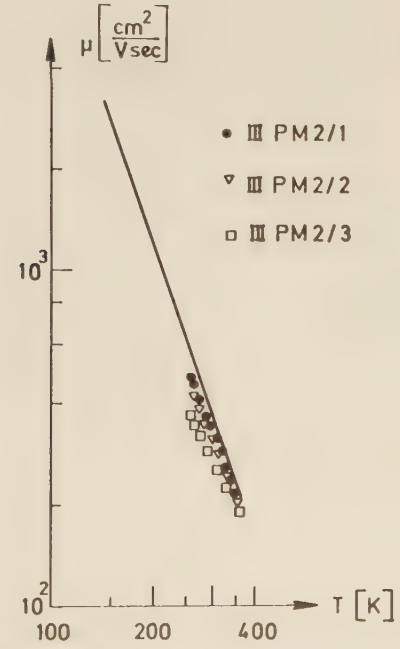

Abb. 28

Hallbeweglichkeit als Funktion der Temperatur einer niedrig p-dotierten Probe nach verschiedenen Verformungen (siehe auch Abb.16)

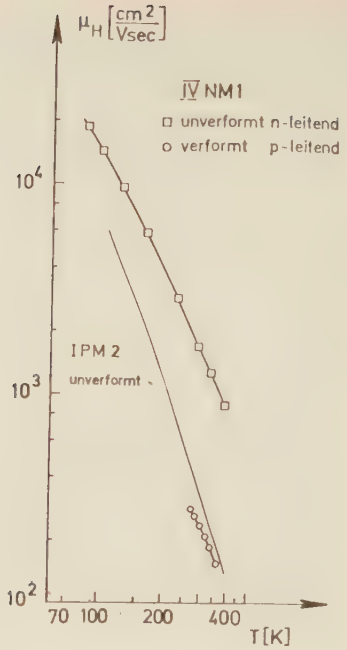

Abb. 29

Abb. 29 und 30:
Hallbeweglichkeit als Funktion der Temperatur von zwei unterschiedlich n-dotierten Proben, die nach der Verformung p-leitend waren. Zum Vergleich ist die Beweglichkeit einer unverformten p-dotierten Probe eingezeichnet.

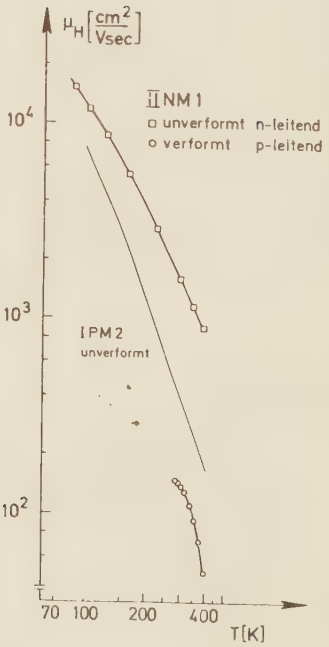

Abb. 30

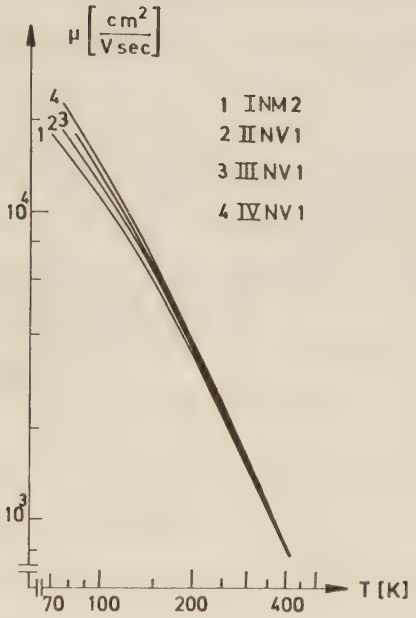

Abb. 31

Hallbeweglichkeit als Funktion der Temperatur für n-dotiertes Silizium. Parameter ist die Dotierung (siehe Tabelle 2).

Tabelle 6

Temperaturabhängigkeit der Hallbeweglichkeit in unverformtem Silizium.

Probe	$\mu_H \left[cm^2/Vs\right]$	Messier und Flores [33]
I P	$6.4\ 10^9\ T^{-2.91}$	
II P	$4.3\ 10^9\ T^{-2.85}$	$(6.4 \pm 0.15)\ 10^9\ T^{-2.91} \left[\frac{cm^2}{Vs}\right]$
III P	$5.9\ 10^9\ T^{-2.91}$	Bestimmt in p-dotiertem Si mit N_{ca}:
		$1.7\ 10^{12} cm^{-3}$
		$2.7\ 10^{12} cm^{-3}$
		$1.5\ 10^{13} cm^{-3}$
I N	$1.8\ 10^8\ T^{-2.05}$	$(2.4 \pm 0.04)\ 10^8\ T^{-2.06} \left[\frac{cm^2}{Vs}\right]$
		Bestimmt in n-dotiertem Si mit N_{cd}:
IV N	$3.5\ 10^8\ T^{-2.15}$	$8\ 10^{12} cm^{-3}$

daß der Streueinfluß von Versetzungen nur noch als kleine Störung der dominierenden Streuung an Phononen meßbar ist. Daher ist dort ein Vergleich mit theoretischen Rechnungen nicht möglich. Bei tieferen Temperaturen sind die Versetzungen stärker geladen. Ein Vergleich ist dann noch unter der Bedingung einer guten Ladungsabschirmung sinnvoll. Ein Maximum im $\mu(T)$ - Verlauf kommt bei tiefen Temperaturen durch den Wechsel des überwiegenden Streuprozesses zugunsten der Streuung an geladenen Versetzungen zustande. Da in der Literatur große Unterschiede bei der Angabe des Temperaturverlaufs der Hallbeweglichkeit in reinem Silizium zu finden sind [31, 33], ist in Tabelle 6 eine Zusammenstellung der Messungen an unverformten Proben gegeben. Die Anpassung erfolgte im Temperaturbereich 150 bis 400 K. Der Fehler beträgt 7%. Die Übereinstimmung mit den Messungen von Messier und Flores [33], die auch eine Übersicht über bisherige Messungen geben, ist recht gut. Abbildung 31 zeigt die Temperaturabhängigkeit der Hallbeweglichkeit in n-dotiertem Silizium für verschiedene Dotierungen. Eine Dotierungsabhängigkeit ist bei p-Silizium im ausgemessenen Temperaturbereich nicht zu erkennen.

5. Bestimmung von E_F und f aus dem Hall-Effekt

Das Ziel dieser Arbeit ist es, die Fermienergie E_F als Funktion von f aus (4) und (3) so genau wie möglich zu bestimmen. Sowohl E_F als auch f werden aus der Trägerdichte und diese aus der Hallkonstanten (12) bestimmt, wobei sich $r_{p,n}$ vor und nach plastischer Verformung unterscheiden kann. Der Fehler von E_F ist über die Abweichung von r von Eins durch $E_F = k_B T \ln r$ gegeben. Da in Silizium die Temperatur, bei der die Versetzungen neutral sind, sehr hoch ist, kann für eine mögliche Abweichung r = 2 (siehe Abschnitt 3.3.) der Fehler von E_F bis zu 0.025 eV betragen.
f wird wesentlich durch die elektrisch aktive Versetzungsdichte bestimmt, die möglicherweise erheblich von der wahren Versetzungsdichte abweichen kann. Da auch in der Bestimmung der wahren Versetzungsdichte mittels Ätzgrübchenzählungen eine große Unsicherheit besteht, ist es eigentlich nur möglich, f relativ zu bestimmen. Das bedeutet, daß außer durch einen Meßfehler von R_H der Fehler von f durch die Änderung von r mit plastischer Verformung sowie durch die Änderung der Ausgangsdotierung, die in Tabelle 3 berücksichtigt wurde (siehe auch Abschnitt 3.4.), gegeben ist.
Es zeigt sich nun, daß für p-Silizium im entscheidenden Temperaturbereich, in dem die Aufladung der Versetzung und damit f sich stark ändert, die Beweglichkeit vor und nach der Verformung durch die Phononenstreuung bestimmt wird (siehe Abschnitt 4.4.). Das bedeutet, daß wir uns bei konstantem Magnetfeld in der $R_H(\omega\tau)$ - Kurve in Abbildung 4 vor und nach der Verformung an derselben Stelle befinden.

R.Schettler [28] hat durch Messung des Hall-Effektes bei hohen Magnetfeldern an unverformtem und verformtem p-Germanium gezeigt, daß bei gleichem $\omega\tau$ eine Änderung von r_p vor und nach plastischer Verformung unter 2% bleibt. Da die Versuchsbedingungen mit denen in dieser Arbeit übereinstimmen und die Ergebnisse der Beweglichkeitsmessungen in p-Silizium sogar günstigere Verhältnisse bezüglich des Streumechanismus zeigen als in p-Germanium [7], kann man annehmen, daß die Änderung von r_p vor und nach plastischer Verformung für p-Silizium klein ist. Es ist daher sinnvoll, die mit (13) angegebene r_p - Korrektur für die unverformten Proben auch für die verformten Proben zu verwenden. Damit bestimmt sich f aus dem ln $1/R_He$(T)-Verlauf der verformten Probe nach

$$f = \frac{\left(\frac{1}{R_He}(T)\right)_{verformt} \cdot r_p(T) - \overline{N}_{ca}}{\overline{N}_b} \qquad (15)$$

Dabei ist $\overline{N}_{ca}$ aus Tabelle 3 entnommen, und $\overline{N}$ ist die elektrisch aktive Versetzungsdichte (siehe Abschnitt 6). Ebenso wird die Fermienergie mit

$$p = \left(\frac{1}{R_He}(T)\right)_{verformt} \cdot r_p(T) \qquad (16)$$

aus (4) bestimmt. Die Änderung von r_p(T) mit der Dotierung liegt unter 1%, so daß die Verunreinigung durch Fremdatome während der Verformungsglühung in r_p nicht berücksichtigt zu werden braucht. r_p wird für die unverformte Probe nach (13) bestimmt, so daß der Fehler von p etwa 4% beträgt.

Für n-dotiertes Silizium ändert sich der Streuprozeß sehr viel stärker (siehe Abschnitt 4.4.), so daß eine Korrektur nach (13) nicht mehr sinnvoll erscheint. Nach einer vorsichtigen Abschätzung in [8] sollte der Wechsel von

überwiegender Phononenstreuung zu überwiegender Versetzungsstreuung nicht mehr als 10% im Fehler von f ausmachen, wenn f maximal 0.1 ist, so daß für n-Silizium auch dann ein Vergleich von $E_F(f)$ mit der theoretischen Beziehung (1) recht gut ist, wenn $r_n(T) = 1$ gesetzt wird.

6. Vergleich mit der Theorie

Im Folgenden soll die aus (4) und (16) experimentell bestimmte Fermienergie E_F als Funktion des Besetzungsgrades f (15) mit der von Schröter und Labusch [11] berechneten Fermienergie verglichen werden. Bei der Probe III PM1/2, deren $\ln 1/R_H e(\frac{1}{T})$ - Verlauf in der Nähe des neutralen Punktes sehr genau ausgemessen wurde, liegt die relative Meßgenauigkeit unter 4%, so daß bei einem Vergleich mit den Experimenten zwischen den beiden Modellvarianten (8a) und (8b) entschieden werden kann. In Abbildung 32a und b sind die experimentellen Werte an die theoretischen Beziehungen (8a) und (8b) optimal angepaßt. Dabei wurde für r_o in (8b) ein sinnvoller Wert von 8 Å angenommen. Wie schon erwähnt, ergibt sich aus der Anpassung für die beiden Modellvarianten ein unterschiedlicher Wert der elektrisch akriven Versetzungsdichte. Man sieht, daß die Beziehung (8b) den experimentellen Verlauf von $E_F(f)$ richtig wiedergibt, während bei (8a) Abweichungen auftreten, die außerhalb der Meßgenauigkeit liegen. Damit ist entschieden, daß die Beziehung (8b) gültig ist. Zu bemerken ist noch, daß (8b) nicht sehr stark von r_o abhängt, da r_o logarithmisch eingeht. Die angepaßte elektrisch aktive Versetzungsdichte ist danach ein Maß für die im Kristall elektrisch wirksame Versetzungsdichte.

In den Abbildungen 33 bis 35 ist die Anpassung der experimentellen Werte an (8b) für die in 4.1. besprochenen p-dotierten Proben vorgenommen worden. Dabei wurde $\overline{E}_o$, das Niveau der neutralen Versetzung für jede Probe aus

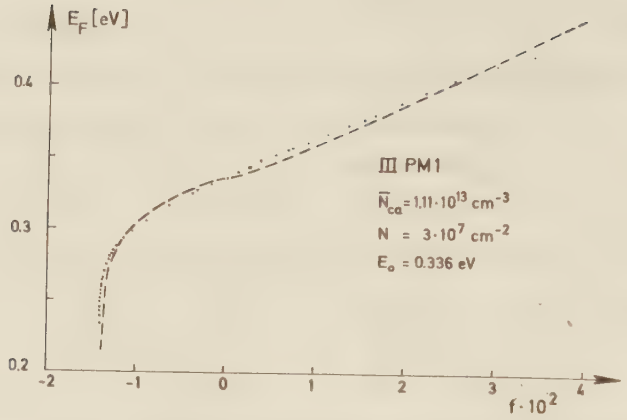

Abb. 32a

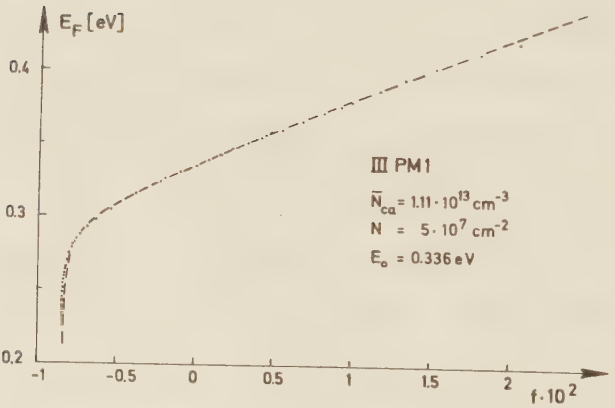

Abb. 32b

Fermienergie E_F als Funktion des Besetzungsgrades f für die Probe III PM1/2. Die theoretischen Kurven sind gestrichelt gezeichnet, die elektrisch aktive Versetzungsdichte N wurde so angepaßt, daß die experimentellen Punkte am besten mit der theoretischen Beziehung (8a), Abb. 32a und (8b), Abb. 32b übereinstimmen.

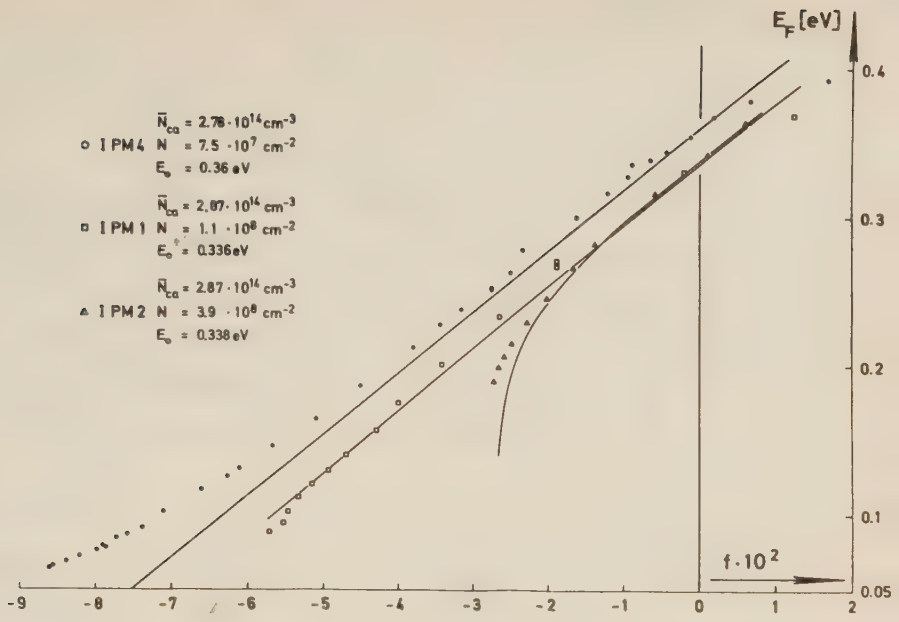

Abb. 33

Fermienergie E_F als Funktion des Besetzungsgrades f für drei p-dotierte Proben der gleichen Ausgangsdotierung. Die theoretischen Kurven sind durchgezogen gezeichnet.

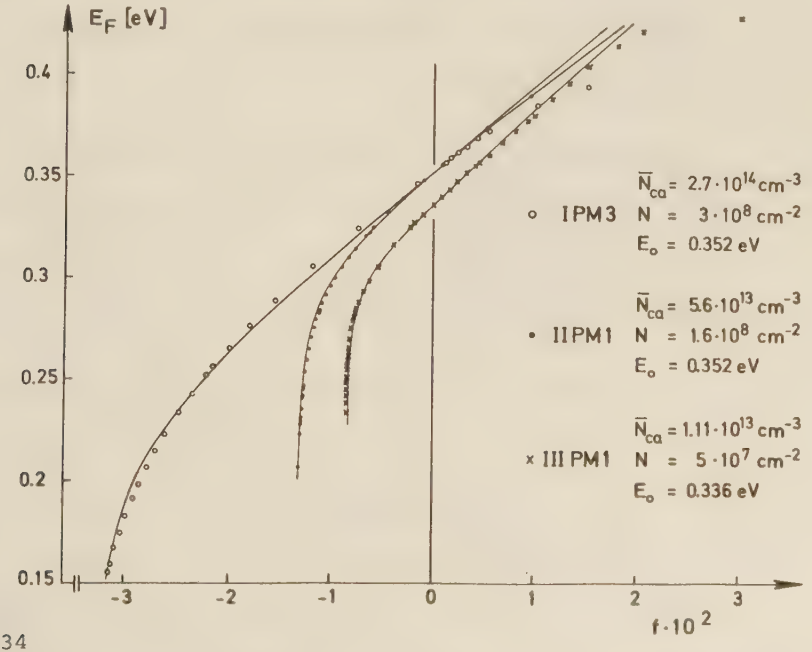

Abb. 34

Fermienergie E_F als Funktion des Besetzungsgrades f für drei p-dotierte Proben unterschiedlicher Ausgangsdotierung. Die theoretischen Kurven sind durchgezogen gezeichnet.

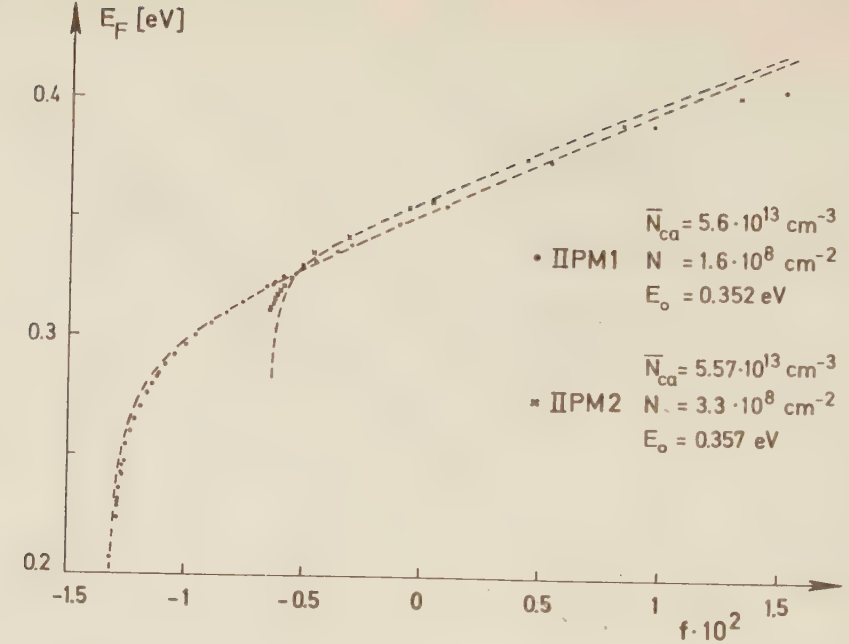

Abb. 35

Fermienergie E_F als Funktion des Besetzungsgrades f für zwei unterschiedlich verformte, p-dotierte Proben gleicher Ausgangsdotierung. Die theoretischen Kurven sind gestrichelt gezeichnet.

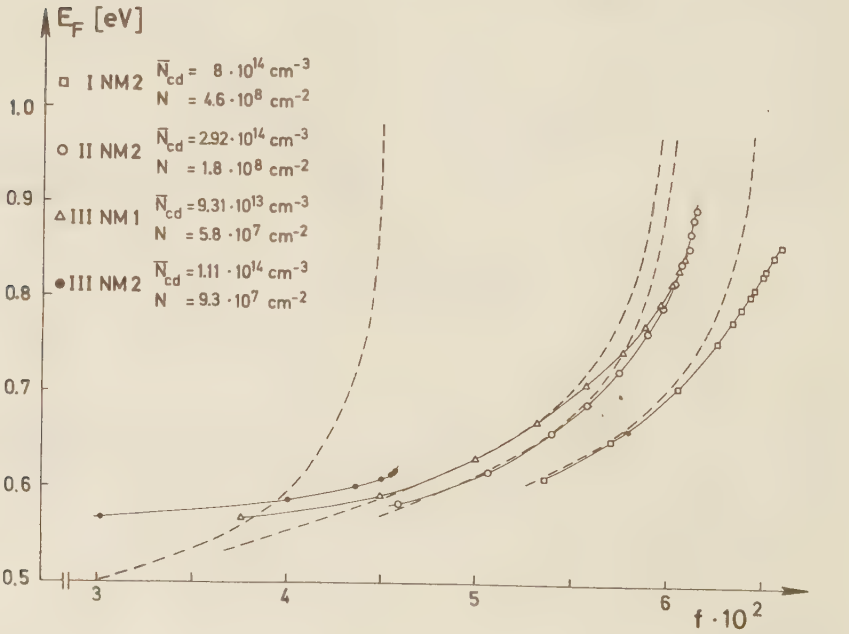

Abb. 36

Fermienergie E_F als Funktion des Besetzungsgrades f für n-dotierte Proben. Die theoretischen Kurven sind gestrichelt gezeichnet.

der $E_F(f)$ - Kurve an der Stelle $f = 0$ ($p = N_{ca}$) entnommen und in (1) eingesetzt. In $\overline{E}_o$ geht über (16) die in Abschnitt 5 besprochene r_p - Korrektur ein sowie über $f = 0$ die Änderung der Ausgangsdotierung während der Verformung ein. Die angepaßten, elektrisch aktiven Versetzungsdichten $\overline{N}$ sind in Tabelle 4 Spalte 1 angegeben, die $\overline{E}_o$ - Werte in Tabelle 5 Spalte 4. Insgesamt erhält man eine sehr gute Übereinstimmung des experimentellen $E_F(f)$ - Verlaufs mit der Beziehung (8b).

In Abbildung 34 ist die theoretisch bedingte, schwache Abhängigkeit der Steigung (9) von $E_F(f)$ bei $f = 0$ zu erkennen. Merkliche Abweichungen vom theoretischen Verlauf bei den größten positiven f-Werten sind durch das Einsetzen von Eigenleitung zu erklären. Die Abweichungen bei großen negativen f-Werten in Abbildung 33 können auf das Vorhandensein von Akzeptorzuständen zurückzuführen sein. Diese Frage konnte jedoch im Rahmen dieser Arbeit nicht geklärt werden.

Die Abweichungen beim Abknicken zu kleinen Fermienergien entsprechend tiefen Temperaturen sind darauf zurückzuführen, daß die verwandte Näherung $V < kT$ ihre Gültigkeit verliert. Entscheidend dafür ist das Überlappen der Potentiale der einzelnen Versetzungen, weshalb diese Abweichungen bei Proben mit hoher Versetzungsdichte stärker sind.

In Abbildung 36 sind für n-dotierte Proben die experimentellen $E_F(f)$ - Kurven, die aus (5) und (6) ohne r-Korrektur bestimmt wurden, an die theoretische Beziehung (8b) angepaßt worden. Dabei wurde der über die einzelnen $\overline{E}_o$ - Werte in Tabelle 5 gemittelte Wert von $\overline{E}_o = 0.347$ eV benutzt. Die Abweichungen vom theoretischen Verlauf für große f und kleine f

entsprechen denen bei p-Proben.

Bei der niedrig dotierten, stark verformten Probe III NM2 ist die Abschirmung des Potentials der geladenen Versetzungen schon so schlecht, daß die Abweichungen vom theoretischen Verlauf beträchtlich sind. Auch bei III NM1 ist diese Tendenz zu erkennen. Der $E_F(f)$ - Verlauf für die Proben I NM1 und IV NM2 ist nicht ausgewertet worden, da sich aufgrund ihres flachen $\ln 1/R_H e(\frac{1}{T})$ - Verlaufs keine eindeutige Funktion $E_F(f)$ ergab; das bedeutet, daß die unbekannte Änderung von r mit der Verformung stark in die f-Bestimmung eingehen muß.

In Tabelle 4 sind die aus der Anpassung gewonnenen elektrisch aktiven Versetzungsdichten $\overline{N}$ den lichtoptisch bestimmten Ätzgrübchendichten N_L gegenübergestellt. g_L ist der Proportionalitätsfaktor zwischen N und 1.5 N_L, wobei 1.5 der Geometriefaktor ist, der die Richtungsverteilung der Versetzungen im Kristall berücksichtigt [40].

$$\overline{N} = g_L \; 1.5 \; N_L$$

$g_L > 1$ bedeutet, daß beim Anätzen nicht alle elektrisch aktiven Versetzungen erfaßt werden. Eine Anpassung an (8a) würde $g_L \approx 1$ werden lassen, wie es auch bisher bei Germanium gefunden wurde [7, 8, 11].

Bei den Proben III PM1/2 und I PM4, die bis in die Verfestigung, also zeitlich länger (40 min statt 10 min) als die übrigen Proben verformt wurden (III PM1/2 durch die 2. Verformung am längsten), ist zu vermuten, daß ein Teil der elektrisch aktiven Versetzungszentren durch Verunreinigungen inaktiviert worden sind. Diese können jedoch keinen großen Einfluß auf die Dotierung haben, da eine Änderung von N um einen Faktor 3

auch eine Dotierungsänderung um diesen Faktor bedeuten würde. Das hätte jedoch bei der Probe III PM1 eine Änderung von E_o = 0.351 eV auf etwa 0.31 eV und bei der Probe I PM4 von E_o = 0.353 eV auf etwa 0.1 eV zur Folge. Das widerspricht einmal der in der Vergleichsprobe gefundenen Dotierungsänderung, sowie dem durch die anderen Proben gesicherten E_o - Wert.

7. Bestimmung des neutralen Versetzungsniveaus

In Abschnitt 6 sind die $\overline{E_o}$ - Werte für die einzelnen Proben aus der experimentellen $E_F(f)$ - Kurve bestimmt und in Tabelle 5 Spalte 4 angegeben worden. Daraus ergibt sich ein Mittelwert für das Niveau der neutralen Versetzung von

$$\overline{(\overline{E_o})} = 0.347 \pm 0.01 eV$$

Weiter wurde E_o ohne r-Korrektur und ohne Berücksichtigung der Dotierungsänderung während der Verformung direkt aus dem Schnittpunkt der $\ln 1/R_H e(\frac{1}{T})$ - Verläufe von unverformter und verformter Probe bestimmt. Es ergeben sich die in Tabelle 5 Spalte 1 und 2 aufgeführten $1/R_H e(T_o)$- und T_o - Werte, aus denen mit (7) E_o in Spalte 3 berechnet wurde.
Man erhält einen Mittelwert von

$$\overline{(E_o)} = 0.344 \pm 0.009 \text{ eV}.$$

Innerhalb der Fehlergrenzen stimmen die beiden Werte überein.

Die Abweichungen der einzelnen $\overline{E_o}$ - Werte vom Mittelwert lassen sich über die Bestimmung von f_1 aus der $E_F(f)$ - Kurve mit $E(f_1) = \overline{(\overline{E_o})}$ in einer Dotierungsänderung $f_1 \overline{N}/_b$ ausdrücken. Daraus erhält man eine korrigierte Ausgangsdotierung $\overset{1}{N}_{ca}$

$$\overset{1}{N}_{ca} = f_1 \overline{N}/_b + \overline{N}_{ca}$$

Ein Vergleich von Tabelle 7, in der $f_1 \overline{N}/_b$ und $\overset{1}{N}_{ca}$ für die einzelnen p-Proben angegeben ist mit Tabelle 3, die die Werte für die Dotierungsänderung in der Vergleichsprobe während der Verformung enthält zeigt, daß die Schwankungen der einzelnen $\overline{E_o}$ - Werte gut mit einer Verunreinigung durch Fremdatome während der Verformung erklärt werden können.

Tabelle 7

Die in einer Dotierungsänderung $f_1 \overline{N}/_b$ ausgedrückte Abweichung der einzelnen $\overline{E_o}$ - Werte vom Mittelwert $(\overline{\overline{E_o}})$.

Probe	$f_1 \cdot \overline{N}/_b \left[10^{12} cm^{-3}\right]$	$\overset{1}{N}_{ca} \left[10^{12} cm^{-3}\right]$
I PM1	7	294
I PM2	20	307
I PM3	- 9	261
I PM4	- 6	272
II PM1	- 4	52
II PM2	-18	37.7
III PM1/2	3	14.1

8. Stark verformte Proben

In Abbildung 37 sind die $E_F(f)$ - Kurven für die in Abschnitt 4.3. beschriebenen stark verformten Proben gezeigt. Bei der Berechnung von E_F aus (4) wurde wieder die in 5. besprochene r_p - Korrektur verwandt. Die elektrisch aktive Versetzungsdichte ließ sich nicht anpassen. Sie wurde in Anlehnung an die p-Proben gewählt.(siehe Tabelle 4 Spalte 1).

Es sind zwei markante Abweichungen von der durch die p-Proben bestätigten theoretischen Bezeihung (8b) festzustellen. Zum einen sind die nach (4) bestimmten Fermienergien in der Nähe von f = 0 merklich größer als bei normalen p-Proben, zum anderen nimmt die Fermienergie zu kleinen f-Werten wieder zu, wohingegen sie dort nach (8b) abnehmen sollte.

In Tabelle 8 ist die aus (2) bestimmte Abschirmlänge λ bei 300°K für alle Proben angegeben. Es zeigt sich bei einem Vergleich mit dem Abstand der elektrisch aktiven Versetzungen $d = 1/\sqrt{N}$ über $4(\lambda/d)^2$, daß sich bei den stark verformten Proben schon bei dieser hohen Temperatur die Potentiale von mehr als 8 Versetzungen überlagern. Zu tieferen Temperaturen nimmt diese Überlagerung noch beträchtlich zu, wie in Tabelle 8 aus Spalte 4 zu entnehmen ist, wo für 250°K die $4(\lambda/d)^2$ - Werte für einige Proben angegeben sind.

Wegen dieser drastischen Zunahme der Abschirmlängen bei tieferen Temperaturen, kann man nicht mehr annehmen, daß die geladenen Versetzungen eine kleine Störung im Gitter sind. Durch die stark überlagerten Versetzungspotentiale werden auch die Störungen des Valenzbandes erheblich. Die Mittelung der Trägerdichte über ein großes Kristallgebiet,

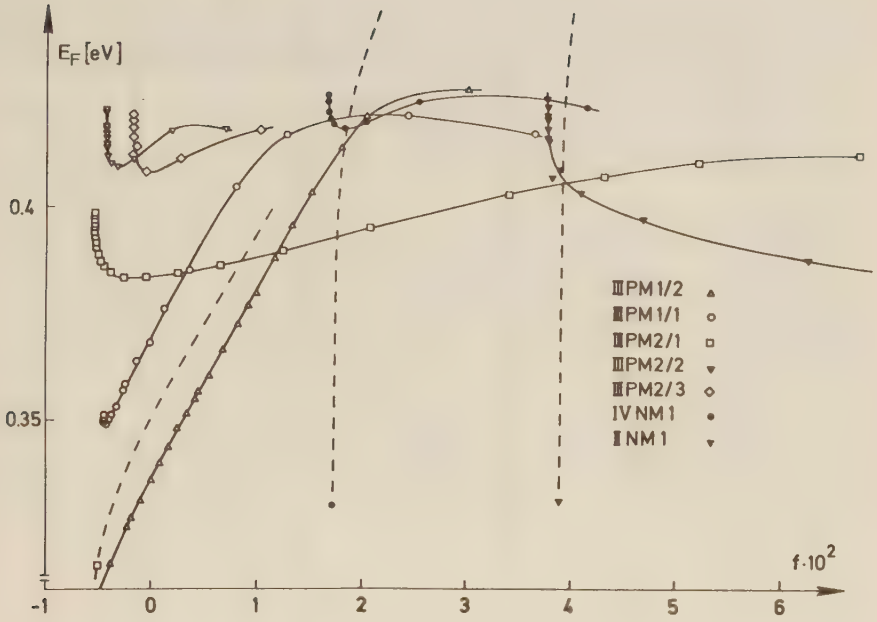

Abb. 37

Fermienergie E_F als Funktion des Besetzungsgrades f für stark verformte Proben. Zum Vergleich ist $E_F(f)$ für die Probe III PM1/2 aus Abb. 32b mit eingezeichnet. Für die Proben III PM2/1, IV NM1 und II NM1 ist der Verlauf der theoretischen Kurve nach (8b) gestrichelt eingezeichnet.

Tabelle 8

Vergleich der Abschirmlänge λ bei 300°K mit dem Abstand der Versetzungen $d = 1/\sqrt{N}$

Probe	1 $\lambda_{300°K}$ [10^{-} °]	2 $d = 1/\sqrt{N}$ [10^{-} °]	3 $4(\lambda/d)^2_{300°}$	4 $4(\lambda/d)^2_{250°K}$
I PM1	2.3	9.5	0.2	0.2
I PM2	2.9	5.1	1.3	2
I PM3	2.9	5.8	1	1.5
I PM4	2.3	12	0.2	0.15
II PM1	6.2	7.9	2.4	6.1
II PM2	7.8	5.5	8	50
III PM1/2	9.3	14	1.8	4.9
III PM1/1	12	8.5	8	85
III PM2/1	19	10	14	196
III PM2/2	31	9.9	40	720
III PM2/3	36	6.6	120	
IV NM1	37	12	38	
II NM1	33	5.8	133	
III NM1	15	1.3	520	
III NM2	107	10	424	
I NM2	6.2	4.7	7	
II NM2	9.5	7.7	6.08	

die man aus dem Hall-Effekt erhält, ist dann mit der effektiven Zustandsdichte im Valenzband in (4) nicht mehr vergleichbar. Unter der Annahme, daß der Hall-Effekt sowie die mit (4) berechnete Fermienergie qualitativ den Verlauf von $E_F(f)$ richtig bestimmen, bedeutet eine Zunahme von E_F bei tiefen Temperaturen und großen Abschirmlängen, daß die Wechselwirkung der Ladungen auf verschiedenen Versetzungen die Energie, um ein weiteres gebundenes Elektron aufzunehmen, stark erhöht.

Daß die aus dem Halleffekt nach (6) bestimmte Fermienergie am neutralen Punkt, wo das Coulombpotential der Versetzung verschwindet, sehr viel größer ist als E_o, kann durch kleine örtliche Dotierungsschwankungen erklärt werden. Ebenso ist für die Erhöhung von E_F bei $f = 0$ eine Zunahme der Wirkung des ebenfalls durch λ abgeschirmten Deformationspotentials möglich.

9. Hallbeweglichkeit

In der Arbeit von Düster und Labusch [19], wurde die Streuung von freien Löchern an Versetzungen unter Berücksichtigung der Streubeiträge von Coulombfeld, Verzerrungsfeld und Phononenstreuung behandelt. Als Ergebnis wurde die Analyse der Beweglichkeit nach einer modifizierten Form der Matthiessen'schen Regel

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{\mu_\varphi} + \frac{A}{\mu_\varepsilon} + \frac{B}{\mu_Q} \qquad (17)$$

vorgeschlagen. Dabei sind μ die Gesamtbeweglichkeit, μ_φ Phononenbeweglichkeit, für die die Beweglichkeit der unverformten Probe eingesetzt wird [19],

$$\mu_\varepsilon = \frac{256\, k_B \hbar e}{27\pi E_1^2 b^2 m^*} \left(\frac{1-\nu}{1-2\nu}\right)^2 \frac{T}{N} \qquad (18)$$

die Beweglichkeit für reine Verzerrungsfeldstreuung (mit dem Deformationspotential E_1 = 6.5 eV nach [41]) und

$$\mu_Q = \frac{30\,\varepsilon^{3/2}(2\pi)^{1/2} b^2 k_B T \sqrt{p}}{e^2 m^{*1/2} \bar{N}(p-\bar{N}_a)^2} \qquad (19)$$

die Beweglichkeit für reine Coulombstreuung [42].
Die Größen B und A sind in [19] als Funktionen von μ_φ/μ_Q numerisch berechnet worden. Dabei wurde der Strom senkrecht zur Versetzungslinie angenommen, was grob mit unserer Versetzungsgeometrie übereinstimmt.
(19) wurde in Bornscher Näherung, also $\ell > \lambda$ (ℓ: mittlere freie Weglänge der freien Ladungsträger) berechnet.
Weiter wurde die Berechnung des Potentials mit der linealisierten Poissongleichung vorgenommen.
In Abbildung 38 ist für drei p-dotierte Proben eine Analyse

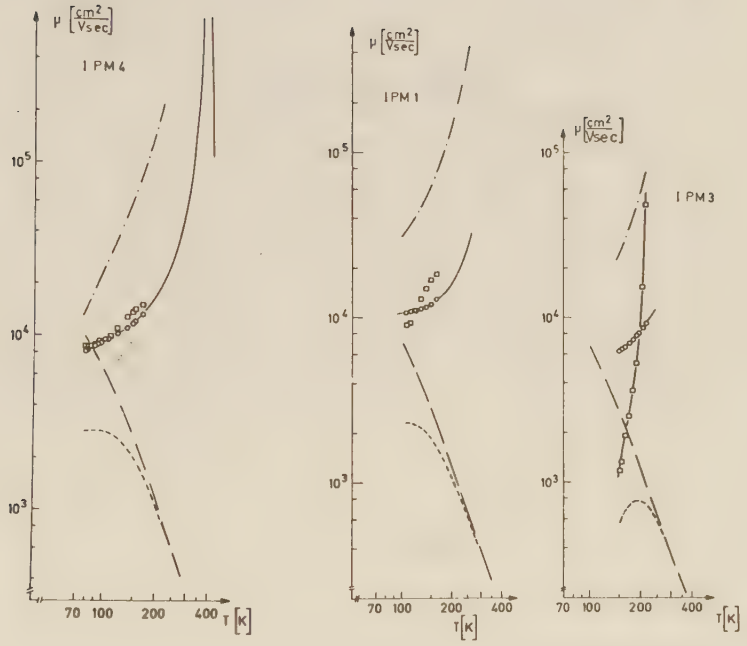

Abb. 38

Hallbeweglichkeit als Funktion der Temperatur für drei p-dotierte Proben. — — vor der Verformung, --- nach der Verformung, —·—·— Beitrag zur Beweglichkeit für die Coulombstreuung an Versetzungen nach Pödor [42], o und durchgezogen nach Düster und Labusch [19] und □ aus einer Analyse der experimentellen Werte (siehe Text).

nach dem Beitrag der Coulombfeldstreuung zur Gesamtbeweglichkeit gezeigt. Strichpunktiert ist μ_Q nach (19) (wobei p nach (16) bestimmt wurde); die offenen Kreise wurden aus μ_Q/μ_B berechnet. Dabei wurde B (μ_φ/μ_Q) aus [19] genommen. Die offenen Quadrate stammen aus einer Anpassung

$$\mu_{Q_{Experiment}} = \left(\frac{1}{\mu} - \frac{1}{\mu_\varphi} - \frac{A}{\mu_\varepsilon}\right)^{-1} \qquad (20)$$

Es wurde A = 1 angenommen [19] und F_ε aus $\mu_\varepsilon = F_\varepsilon\, T/N$ so angepaßt, daß (20) und μ_Q/μ_B aus (19) etwa übereinstimmen. Dabei ergibt sich F_ε bei Verwendung von $\overline{N}$ im Vergleich zu (18) um eine Größenordnung zu klein. Das kann sowohl an der Unsicherheit von E_1 als auch daran liegen, daß die hier eingehende wahre Versetzungsdichte größer ist als die verwendete elektrisch aktive Versetzungsdichte.
Man erhält für tiefe Temperaturen im Vergleich von (20) und μ_Q/μ_B nach (19) eine gute Übereinstimmung der experimentellen Werte mit μ_Q/μ_B. Das gilt für die schwach verformte Probe I PM4, für die die Abschirmlänge λ entsprechend einer geringen Reduktion der Trägerdichte bei tiefen Temperaturen (siehe Abbildung 6) klein ist. Mit stärkerer Verformung wird λ bei tiefen Temperaturen größer (siehe auch Tabelle 8). Das führt zu einer anderen Temperaturabhängigkeit von (20), wie in Abbildung 38 bei Probe I PM3 zu erkennen ist. Für $\ell \ll \lambda$ verliert die Streutheorie von [19] ihre Gültigkeit. Für den Übergang zu höheren Temperaturen oder größeren Versetzungsdichten wäre eine Theorie wünschenswert, die die Versetzungsstreuung nach der Bornschen Näherung und etwa die Transporttheorie von Pekar und Kornyushin [18] enthält. Da diese Theorien die

linearisierte Poissongleichung bei der Berechnung des Potentials der geladenen Versetzung verwenden, ist ein Vergleich mit den Experimenten nur in der Nähe des neutralen Punktes sinnvoll. Hier überwiegt jedoch bei Silizium der Einfluß der Streuung an Phononen, so daß eine genaue Analyse der Beweglichkeit im Rahmen der Meßgenauigkeit nicht möglich ist, (19) gibt jedoch qualitativ den Beitrag der Streuung an den geladenen Versetzungen zur Gesamtbeweglichkeit richtig wieder. Danach nimmt die Reduktion der Beweglichkeit mit steigender Versetzungsdichte zu. Bei gleicher Versetzungsdichte bei tiefen Temperaturen ist die Reduktion der Trägerdichte in niedrig dotiertem Material stärker und damit nach (19) auch die Reduktion der Beweglichkeit.

10. Vergleich mit anderen Autoren

Die Gültigkeit des Modells eines eindimensionalen, halbgefüllten Stufenversetzungsbandes konnte innerhalb der Theorie der Elektronenzustände von Versetzungen von Schröter und Labusch [11] für höher dotiertes, druckverformtes p- als auch n-Silizium bestätigt werden. Die Messungen von Weber [13] an p-Silizium stimmen darin bis auf die in 1. erwähnte Abhängigkeit des E_o - Wertes von der Versetzungsdichte und der Dotierung mit denen dieser Arbeit überein. Scheibe [46] hat in einem gezielten Experiment verformtes Silizium mit Gold, das in Silizium substitutionell gelöst ein Donatorniveau bei 0.35 eV und interstitiell gelöst ein Donatorniveau von 0.4 eV oberhalb der Valenzbandkante hat [46], dotiert und wie Weber bei 370 °C als auch bei 650°C geglüht. Seine Arbeit zeigt, daß die Verunreinigung mit Gold tatsächlich einen Einfluß auf den $\ln 1/R_H e(\frac{1}{T})$ - Verlauf bei hohen Temperaturen und damit eine Verschiebung der Fermienergie vor und nach der Glühung in der Nähe des neutralen Punktes zur Folge hat. Die Änderung des $E_F(f)$ - Verlaufs ist jedoch nicht ganz so stark wie bei Glühexperimenten von Weber, was durch eine geringere aufgebrachte Goldschicht bei [46] zu erklären ist.

Die Messungen der elektrischen Leitfähigkeit σ in n-Silizium von Glaenzer und Jordan [47], die nach plastischer Verformung eine starke Reduktion von σ erhalten, deuten auf ein Akzeptorverhalten der Versetzungen in Übereinstimmung mit dem in dieser Arbeit bestätigten elektrischen Versetzungsmodell hin. Ebenso paßt das von ihnen festgestellte

Donatorverhalten der Versetzung unterhalb von Raumtemperatur (bei E_o = 0.35 eV und den verwendeten Dotierungen $N_{ca} > 6 \cdot 10^{13} cm^{-3}$ sollten die Versetzungen unterhalb 340°K positiv geladen sein) in dieses Bild. Die aus Messungen der Trägerlebensdauern [50] bestimmten Donatorzustände der Versetzung von 0.50, 0.42 bzw. 0.38 eV oberhalb der Valenzbandkante in p-Silizium, und ein Akzeptorniveau der Versetzung von 0.52 eV unterhalb der Leitungsbandkante in n-Silizium konnten durch die Messung des Hall-Effektes in dieser Arbeit nicht bestätigt werden.

11. Zusammenfassung

Es wurde die Trägerdichte und die Hallbeweglichkeit in Abhängigkeit von der Temperatur (77 bis 420 °K) in Silizium-Einkristallen vor und nach plastischer Verformung gemessen. Parameter waren Dotierung (zwischen $3 \cdot 10^{14}$ Akzeptoren und $8 \cdot 10^{14}$ Donatoren pro cm^3) und Verformungsgrad. Die Meßergebnisse für höher dotiertes p- als auch n-Material sind in guter Übereinstimmung mit der von Schröter und Labusch entwickelten Theorie der Elektronenzustände an Versetzungen. Die Lage der Besetzungsgrenze des eindimensionalen, halbgefüllten Stufenversetzungsbandes im neutralen Zustand wurde zu 0.347 ± 0.01 eV über der Valenzbandkante bestimmt. Bei niedrig dotierten, stark verformten Si-Proben, für die die Gültigkeitsbedingung der Theorie $N \ll \frac{1}{4\lambda^2}$ (N Versetzungsdichte, λ Debye'sche Abschirmlänge) erheblich verletzt war, wurden quantitative und qualitative Abweichungen von der Theorie festgestellt. Eine Analyse der Beweglichkeitsmessungen an Hand der modifizierten Form der Matthiessen'schen Regel mit den Streubeiträgen von abgeschirmtem Coulombpotential, Verzerrungsfeld und Phononenstreuung von Düster und Labusch konnte nur bei tiefen Temperaturen und starker positiver Aufladung der Versetzungen vorgenommen werden, wo die Gültigkeit der Streutheorie entsprechend den Ergebnissen nicht mehr sehr gut ist. Eine Analyse in der Nähe des neutralen Punktes scheiterte an der dort überwiegenden Phononenstreuung. Bei tiefen Temperaturen nimmt die Reduktion der Beweglichkeit sowohl bei n- als auch bei p-Material mit steigender Versetzungsdichte zu. Bei gleicher Versetzungsdichte ist die Reduktion der Beweglichkeit in niedriger dotiertem Silizium stärker. Das ist qualitativ in Übereinstimmung mit der Theorie.

Literaturverzeichnis

[1] W.Shockley, Phys.Rev. 91, 228 (1953)

[2] G.L.Pearson, W.T.Read und F.J.Morin,
Phys.Rev. 93, 666 (1954)

[3] R.A.Logan, G.L.Pearson und D.A.Kleinmann,
J.Appl.Phys. 30, 885 (1959)

[4] R.M.Broudy, Adv.Phys. 12, 135 (1963)

[5] B.Pödör, Acta Phys.Hungaria 23, 393 (1967)

[6] L.Blieck und W.Schröter, phys.stat.sol 14, K55 (1966)

[7] W.Schröter , phys.stat.sol 21, 211 (1967)

[8] R.Labusch und R.Schettler, phys.stat.sol (a)9, 455 (1972)

[9] W.T.Read jr.,Phil.Mag. 45, 775 (1954)

[10] W.T.Read jr.,Phil.Mag. 45, 1119 (1954)

[11] W.Schröter und R.Labusch, phys.stat.sol. 36, 359 (1969)

[12] R.Wagner, phys.stat.sol (a) 24, 575 (1974)

[13] H.Weber, Diplomarbeit, Göttingen (1974)

[14] H.Weber, W.Schröter und P.Haasen
Helv.Phys.Acta 41, 1255 (1969)

[15] F.Düster und R.Schettler, Wiss.Ber.HMFA Braunschweig
3, 24 (1975)

[16] W.T.Read jr.,Phil.Mag. 46, 111 (1955)

[17] S.I.Pekar, Soviet Phys.-Solid State 8, 890 (1966)

[18] Yu.V.Kornyushin und S.I.Pekar,
Soviet Phys.-Solid State 8, 895 (1966)

[19] F.Düster und R.Labusch, phys.stat.sol (b) 60, 161 (1973)

[20] R.Labusch und W.Schröter, Dislocations,
A Collective Treatise, ed.F.N.R.Nabarro, 1974 i.Druck

[21] R.Wagner und P.Haasen, Inst.Phys.Conf.Ser.No 23
(1975) Chapter 6

[22] R.Labusch und W.Schröter, Inst.Phys.Conf. Ser.No 23 (1975) Chapter 6

[23] W.Güth und W.Haist, phys.stat.sol 17, 691 (1966)

[24] H.Alexander, persönliche Mitteilung

[25] I.Isenberg, B.R.Russel und R.F.Greene, Rev.Sci.Instr. 19, 685 (1948)

[26] A.F.Bogenschütze, Ätzpraxis für Halbleiter, C.Hauer Verlag, München 1967, S.93,94

[27] R.Schettler und R.Labusch. phys.stat.sol (a) 22, 579 (1974)

[28] R.Schettler, Crystal Lattice Defects 6, 11 (1975)

[29] A.C.Beer. Solid State Physics, Suppl. 4 (1963)

[30] L.D.Partain, M.R.Lakshminarayana, J.of Apl.Phys. 47, 1015 (197

[31] E.H.Putley, The Halleffect and related phenomena, London Butterworth 1960

[32] D.Long und J.Myers, Phys.Rev.115, 1119 (1959)

[33] J.Messier und J.M.Flores, J.Phys,Chem.Sol 24, 1539 (1963)

[34] G.W.Ludwig und R.L.Watters, Phys.Rev.6, 1699 (1956)

[35] B.Keppich, P.Haasen und B.Ilschner, Acta Met.12, 1283 (1964)

[36] F.-D.Wöhler, Z.f.Metallkde 62, 240 (1971)

[37] W.A.Porter, A.Gupta und D.L.Swindle, J.Electrochem. Soc.: Solid-State Science and Technology 120, 589 (1973)

[38] E.Sirtl und A.Adler, Z.f.Metallkde 52, 529 (1961)

[39] R.A.Smith, Semiconductors, Cambridge University Press 1959

[40] W.Schröter, H.Alexander und P.Haasen, phys.stat.sol. 7,983(1964

[41] D.L.Dexter und F.Seitz, Phys.Rev. 86, 964 (1952)

[42] B.Pödör, phys.stat.sol. 16, K 167 (1966)

[43] W.R.Runyan, Silicon Semiconductor Technology Mc.Graw-Hill Book Company, New York (1965)

[44] R.W.Keyes, J.appl.Phys. 30, 454 (1959)

[45] Y.P.Varshin, Physica 34, 149 (1967)

[46] E.Scheibe, Diplomarbeit Göttingen (1976)

[47] R.H.Glaenzer und A.G.Jordan,
solic-State Electronics 12, 259 (1969)

[48] P.Haasen, Z.Physik 167, 461 (1962)

[49] H.Alexander und P.Haasen in "Festkörperprobleme"
Vol. VIII p.268. Vieweg, Braunschweig (1968)

[50] R.H.Glaenzer und Jordan,
Solid-State Electronics 12, 247 (1969)

$\epsilon = 12\,\epsilon_o$ [39]

$m_p^* = 0.51\ m_e$ [44]

$m_n^* = 0.25\ m_e$

$\epsilon_o = 8.8542\ 10^{-12}\ As/Vm$

$m_e = 9.1091\ 10^{-31}\ VAs^3m^{-2}$

$k_B = 1.3804\ 10^{-23}\ VAs\ K^{-1}$

$e = 1.6021\ 10^{-19}\ As$

$\hbar = 1.0545\ 10^{-34}\ VAs^2$

$C_i = 0.577216$ (Euler-Konstante)

$b = a/2\ [110] = 3.84$ Å

$a = 5.4307$ Å [43]

$C_V = 1.95\ 10^{15}\ cm^{-3}K^{-3/2}$ [39]

$C_L = 5.4\ 10^{15}\ cm^{-3}K^{-3/2}$

$n_i^2 = 1.5\ 10^{33}T^3\ e^{-\frac{121}{kT}}$ [31]

$E_G(T) = E_G(0) - \alpha T^2/(\beta + T)$

$\alpha = 0.7021\ 10^{-3}\ eV\ K^{-1}$ [45]

$\beta = 1108\ K$

$E_G(0) = 1.1557$ eV

$\nu = 0.37$ Poissonsche Zahl [41]

Ge: $\epsilon = 16\,\epsilon_o$

$C_V = 1.17\ 10^{16}\ cm^{-3}\ K^{-3/2}$ [39]

Ich danke Herrn Prof.P.Haasen für die Möglichkeit der Durchführung dieser Arbeit und deren Förderung und Betreuung.
Ebenso gilt mein Dank Herrn Prof.R.Labusch, Herrn Prof.W.Schröter und Herrn Dr.R.Wagner für zahlreiche Anregungen und wertvolle Diskussionen.
Herrn Dipl.Phys.R.Schettler danke ich für die Benutzung der von ihm aufgebauten Verformungsapparatur sowie für seine ständige Diskussionsbereitschaft.
Herrn Dr.H.-G.Brion gilt mein Dank für die Hilfe im Hall-Labor.
Ferner danke ich der Werkstatt und den Angestellten des Instituts für ihre technische Hilfe und die Anfertigung der Zeichnungen. Frau U.Fritz danke ich für die Hilfe bei der Anfertigung des Manuskriptes.
Diese Arbeit wurde durch Mittel des Sonderforschungsbereiches 126 Göttingen-Clausthal gefördert; insbesondere wurden die elektrischen Messungen im Magnetlabor des SFB 126 durchgeführt.
Die Hochmagnetfeldmessungen wurden von der HMFA Braunschweig gefördert.

L e b e n s l a u f

Name:	Fritz Düster
Geburtstag:	5.Oktober 1944
Geburtsort:	Stuhm/Westpreußen
Vater:	Fritz Düster, Regierungsamtmann
Mutter:	Anna Düster, geborene Globert
Nationalität:	deutsch
Familienstand:	ledig
Schulbildung:	
1951-1956	Volksschule
1956-1961	Gymnasium Raabeschule, Braunschweig
1961-1965	Gymnasium Tellkampfschule, Hannover, Math.-Nat. Zweig
Februar 1965	Abitur
Studium:	
1965-1975	Studium der Physik an der Georg-August-Universität Göttingen
1968	Diplom-Vorpfüfung im Fach Physik
1971	Diplomarbeit unter Anleitung von Prof.Dr.R.Labusch mit dem Thema:"Streuung freier Ladungsträger an Versetzungen in p-dotierten Halbleitern".
1976	vorliegende Promotionsarbeit mit dem Thema "Elektrische Eigenschaften von Stufenversetzungen in Silizium".